

# Metabolomic Data Analysis with MetaboAnalyst 5.0

Name: guest6398557114152749881

May 24, 2021

## 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	PubChem	KEGG
1	HMDB0004983	Dimethyl sulfone	HMDB0004983	6213	C0004983
2	HMDB0062030	NA	NA	NA	N
3	HMDB0040145	NA	NA	NA	N
4	HMDB0013742	2-Furanmethanol	HMDB0013742	7361	C0013742
5	HMDB0034245	NA	NA	NA	N
6	HMDB0029609	5-Methyl-2(3H)-furanone	HMDB0029609	11558	C0029609
7	HMDB0167282	NA	NA	NA	N
8	HMDB0179973	NA	NA	NA	N
9	HMDB0177063	NA	NA	NA	N

10	HMDB0167281	NA	NA	NA	N
11	HMDB0167283	NA	NA	NA	N
12	HMDB0012880	Acetamidopropanal	HMDB0012880	5460495	C
13	HMDB0034208	Pterolactam	HMDB0034208	181561	
14	HMDB0000162	L-Proline	HMDB0000162	145742	C
15	HMDB0003411	D-Proline	HMDB0003411	8988	C
16	HMDB0030409	4-Amino-2-methylenebutanoic acid	HMDB0030409	5318003	
17	HMDB0171727	NA	NA	NA	N
18	HMDB0032356	N-Lactoyl ethanolamine	HMDB0032356	95457	
19	HMDB0039499	NA	NA	NA	N
20	HMDB0031658	L-2-Amino-5-hydroxypentanoic acid	HMDB0031658	95562	
21	HMDB0000167	L-Threonine	HMDB0000167	6288	C
22	HMDB0061148	NA	NA	NA	N
23	HMDB0162440	NA	NA	NA	N
24	HMDB0155268	NA	NA	NA	N
25	HMDB0240310	NA	NA	NA	N
26	HMDB0000719	L-Homoserine	HMDB0000719	12647	C
27	HMDB0159152	NA	NA	NA	N
28	HMDB0061877	NA	NA	NA	N
29	HMDB0004041	L-Allothreonine	HMDB0004041	99289	C
30	HMDB0159151	NA	NA	NA	N
31	HMDB0060587	NA	NA	NA	N
32	HMDB0184570	NA	NA	NA	N
33	HMDB0178247	NA	NA	NA	N
34	HMDB0172027	NA	NA	NA	N
35	HMDB0172028	NA	NA	NA	N
36	HMDB0168831	NA	NA	NA	N
37	HMDB0000060	Acetoacetic acid	HMDB0000060	96	C
38	HMDB0000005	2-Ketobutyric acid	HMDB0000005	58	C
39	HMDB0001172	2-Methyl-3-oxopropanoic acid	HMDB0001172	296	C
40	HMDB0001259	Succinic acid semialdehyde	HMDB0001259	1112	C
41	HMDB0003381	4-Hydroxycrotonic acid	HMDB0003381	6155526	
42	HMDB0031646	Acetic anhydride	HMDB0031646	7918	
43	HMDB0002217	(S)-Methylmalonic acid semialdehyde	HMDB0002217	5462303	C
44	HMDB0171690	NA	NA	NA	N
45	HMDB0040246	NA	NA	NA	N
46	HMDB0039844	NA	NA	NA	N
47	HMDB0032447	1,5-Octadien-3-one	HMDB0032447	5352874	
48	HMDB0031686	(E,E)-2,4-Octadienal	HMDB0031686	5283329	
49	HMDB0032446	trans, trans-3,5-Octadien-2-one	HMDB0032446	5352876	
50	HMDB0031414	2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	HMDB0031414	10887898	
51	HMDB0040272	2-Butylfuran	HMDB0040272	20534	
52	HMDB0033238	2-Isopropyl-5-methylfuran	HMDB0033238	10678230	
53	HMDB0061898	NA	NA	NA	N
54	HMDB0062073	NA	NA	NA	N
55	HMDB0031582	6-Methyl-3,5-heptadien-2-one	HMDB0031582	12510894	
56	HMDB0061886	NA	NA	NA	N
57	HMDB0031326	2-Ethoxybutane	HMDB0031326	17586	
58	HMDB0012971	1-Hexanol	HMDB0012971	8103	C
59	HMDB0031493	3-Hexanol	HMDB0031493	12178	
60	HMDB0165594	NA	NA	NA	N
61	HMDB0059889	NA	NA	NA	N
62	HMDB0033676	(Ás)-3-Methyl-1-pentanol	HMDB0033676	11508	
63	HMDB0062726	NA	NA	NA	N
64	HMDB0176565	NA	NA	NA	N
65	HMDB0163319	NA	NA	NA	N
66	HMDB0163315	NA	NA	NA	N
67	HMDB0163318	NA	NA	NA	N
68	HMDB0163317	NA	NA	NA	N
69	HMDB0163316	NA	NA	NA	N
70	HMDB0000392	2-Octenoic acid	HMDB0000392	5282713	
71	HMDB0031293	2,3-Octanedione	HMDB0031293	11449	
72	HMDB0029761	Ethyl (Ás)-2-methyl-4-pentenoate	HMDB0029761	62024	
73	HMDB0031403	Cyclohexanecarboxylic acid	HMDB0031403	21363	
74	HMDB0035422	4-Butyl-gamma-butyrolactone	HMDB0035422	7704	
75	HMDB0031352	Cyclohexyl acetate	HMDB0031352	12146	C
76	HMDB0031343	Methyl cyclohexanecarboxylate	HMDB0031343	20748	
77	HMDB0036212	NA	NA	NA	N
78	HMDB0032533	trans-3-Hexenyl acetate	HMDB0032533	5352557	
79	HMDB0240301	NA	NA	NA	N
80	HMDB0032164	Allyl valerate	HMDB0032164	80606	
81	HMDB0037624	NA	NA	NA	N
82	HMDB0032266	Ethyl (E)-3-hexenoate	HMDB0032266	5362623	
83	HMDB0001568	trans-2-Octenoic acid	HMDB0001568	5282714	
84	HMDB0038036	NA	NA	NA	N
85	HMDB0039793	NA	NA	NA	N
86	HMDB0037630	NA	NA	NA	N
87	HMDB0038310	NA	NA	NA	N
88	HMDB0039872	NA	NA	NA	N
89	HMDB0037622	NA	NA	NA	N
90	HMDB0040215	cis-3-Hexenyl acetate	HMDB0040215	5363388	C
91	HMDB0040212	NA	NA	NA	N
92	HMDB0032268	Ethyl 2E-hexenoate	HMDB0032268	5364778	
93	HMDB0036236	NA	NA	NA	N
94	HMDB0032278	Ethyl trans-2-methyl-2-pentenoate	HMDB0032278	6436311	
95	HMDB0032207	cis-5-Octenoic acid	HMDB0032207	5282718	
96	HMDB0032267	Ethyl 5-hexenoate	HMDB0032267	6420258	

97	HMDB0059908	NA	NA	NA
98	HMDB0013897	4-ene-Valproic acid	HMDB0013897	104896
99	HMDB0013903	(3Z)-2-Propylpent-3-enoic acid	HMDB0013903	24892812
100	HMDB0061342	NA	NA	NA
101	HMDB0013902	2-ene-Valproic acid	HMDB0013902	6437068
102	HMDB0013904	(3E)-2-Propylpent-3-enoic acid	HMDB0013904	6439747
103	HMDB0062077	NA	NA	NA
104	HMDB0062166	NA	NA	NA
105	HMDB0061716	NA	NA	NA
106	HMDB0060650	NA	NA	NA
107	HMDB0171680	NA	NA	NA
108	HMDB0013773	D-Leucine	HMDB0013773	117670482
109	HMDB0062052	NA	NA	NA
110	HMDB0171681	NA	NA	NA
111	HMDB0171682	NA	NA	NA
112	HMDB0168722	NA	NA	NA
113	HMDB0168719	NA	NA	NA
114	HMDB0003640	Beta-Leucine	HMDB0003640	439734
115	HMDB0001645	L-Norleucine	HMDB0001645	21236
116	HMDB0000557	L-Alloisoleucine	HMDB0000557	99288
117	HMDB0001901	Aminocaproic acid	HMDB0001901	564
118	HMDB0000172	L-Isoleucine	HMDB0000172	6306
119	HMDB0000687	L-Leucine	HMDB0000687	6106
120	HMDB0062203	NA	NA	NA
121	HMDB0033923	(Ás)-erythro-Isoleucine	HMDB0033923	6306
122	HMDB0240479	NA	NA	NA
123	HMDB0036382	NA	NA	NA
124	HMDB0168720	NA	NA	NA
125	HMDB0168721	NA	NA	NA
126	HMDB0145163	NA	NA	NA
127	HMDB0029168	3-Aminocaproic acid	HMDB0029168	5275645
128	HMDB0144645	NA	NA	NA
129	HMDB0165582	NA	NA	NA
130	HMDB0169664	NA	NA	NA
131	HMDB0169695	NA	NA	NA
132	HMDB0179342	NA	NA	NA
133	HMDB0179343	NA	NA	NA
134	HMDB0179341	NA	NA	NA
135	HMDB0179344	NA	NA	NA
136	HMDB0179345	NA	NA	NA
137	HMDB0179346	NA	NA	NA
138	HMDB0179351	NA	NA	NA
139	HMDB0165583	NA	NA	NA
140	HMDB0165581	NA	NA	NA
141	HMDB0163350	NA	NA	NA
142	HMDB0163351	NA	NA	NA
143	HMDB0163354	NA	NA	NA
144	HMDB0163352	NA	NA	NA
145	HMDB0163353	NA	NA	NA
146	HMDB0165584	NA	NA	NA
147	HMDB0163703	NA	NA	NA
148	HMDB0163702	NA	NA	NA
149	HMDB0000453	Delta-Hexanolactone	HMDB0000453	13204
150	HMDB0039581	NA	NA	NA
151	HMDB0032490	Prenyl formate	HMDB0032490	110373
152	HMDB0033568	5-Oxohexanal	HMDB0033568	10953466
153	HMDB0060476	epsilon-Caprolactone	HMDB0060476	10401
154	HMDB0240384	NA	NA	NA
155	HMDB0061929	NA	NA	NA
156	HMDB0031158	2-Methyl-4-pentenoic acid	HMDB0031158	549519
157	HMDB0031562	2-Methyl-3-pentenoic acid	HMDB0031562	71587183
158	HMDB0031559	4-Methyl-2,3-pentanedione	HMDB0031559	24115
159	HMDB0003843	Gamma-Caprolactone	HMDB0003843	12756
160	HMDB0010719	trans-Hex-2-enoic acid	HMDB0010719	5282707
161	HMDB0031561	4-Methyl-2-pentenoic acid	HMDB0031561	12216200
162	HMDB0031492	3,4-Hexanedione	HMDB0031492	62539
163	HMDB0040328	NA	NA	NA
164	HMDB0029487	Allyl propionate	HMDB0029487	61319
165	HMDB0031501	3-Hexenoic acid	HMDB0031501	5355152
166	HMDB0031560	2-Methyl-2-pentenoic acid	HMDB0031560	6436344
167	HMDB0031491	2,3-Hexanedione	HMDB0031491	19707
168	HMDB0061965	NA	NA	NA
169	HMDB0062135	NA	NA	NA
170	HMDB0013812	1-Nitrohexane	HMDB0013812	NA
171	HMDB0032538	Triethanolamine	HMDB0032538	7618
172	HMDB0062718	NA	NA	NA
173	HMDB0003374	D-Ornithine	HMDB0003374	71082
174	HMDB0000214	Ornithine	HMDB0000214	6262
175	HMDB0032455	NA	NA	NA
176	HMDB0062654	NA	NA	NA
177	HMDB0061901	NA	NA	NA
178	HMDB0061902	NA	NA	NA
179	HMDB0061899	NA	NA	NA
180	HMDB0040966	NA	NA	NA
181	HMDB0061900	NA	NA	NA
182	HMDB0031223	Enol-3-Ethyl-1,2-cyclopentanedione	HMDB0031223	62752
183	HMDB0034835	3-(3-Ethylloxiranyl)-2-propenal	HMDB0034835	6444055

184	HMDB0031222	3-Ethyl-1,2-cyclopentanedione	HMDB0031222	114535
185	HMDB0041474	NA	NA	NA
186	HMDB0033629	xi-4-Hydroxy-4-methyl-2-cyclohexen-1-one	HMDB0033629	155465
187	HMDB0040445	NA	NA	NA
188	HMDB0032067	Allyl crotonate	HMDB0032067	92337821
189	HMDB0032333	4-Hydroxy-4-methyl-5-hexenoic acid gamma lactone	HMDB0032333	102550
190	HMDB0029582	Methyl sorbate	HMDB0029582	5323650
191	HMDB0034080	3-Methyl-1,2-cyclohexanedione	HMDB0034080	3321360
192	HMDB0037027	NA	NA	NA
193	HMDB0037026	NA	NA	NA
194	HMDB0030410	L-2-Amino-3-methylenehexanoic acid	HMDB0030410	76223581
195	HMDB0038949	NA	NA	NA
196	HMDB0004827	Proline betaine	HMDB0004827	7016563
197	HMDB0145126	NA	NA	NA
198	HMDB0000062	L-Carnitine	HMDB0000062	2724480
199	HMDB0062496	Malonyl-Carnitin	HMDB0062496	3770
200	HMDB0062634	NA	NA	NA
201	HMDB0155786	NA	NA	NA
202	HMDB0041922	NA	NA	NA
203	HMDB0032380	(S1)-Methoxy-3-heptanethiol	HMDB0032380	12009861
204	HMDB0060722	NA	NA	NA
205	HMDB0029806	Methyl nicotinate	HMDB0029806	7151
206	HMDB0015687	Salicylamide	HMDB0015687	5147
207	HMDB0000875	Trigonelline	HMDB0000875	5570
208	HMDB0001123	2-Aminobenzoic acid	HMDB0001123	227
209	HMDB0001392	p-Aminobenzoic acid	HMDB0001392	978
210	HMDB0001891	m-Aminobenzoic acid	HMDB0001891	7419
211	HMDB0001538	3-Pyridylacetic acid	HMDB0001538	108
212	HMDB0011178	Prolylglycine	HMDB0011178	98206
213	HMDB0000721	Glycylproline	HMDB0000721	79101
214	HMDB0159132	NA	NA	NA
215	HMDB0032232	2,5-Dimethyl-4-ethoxy-3(2H)-furanone	HMDB0032232	3017596
216	HMDB0031101	8-Hydroxy-5,6-octadienoic acid	HMDB0031101	54042244
217	HMDB0060684	NA	NA	NA
218	HMDB0059757	NA	NA	NA
219	HMDB0059727	NA	NA	NA
220	HMDB0041606	NA	NA	NA
221	HMDB0033838	Diethyl succinate	HMDB0033838	31249
222	HMDB0002023	Ethyladipic acid	HMDB0002023	152459
223	HMDB0000893	Suberic acid	HMDB0000893	10457
224	HMDB0159133	NA	NA	NA
225	HMDB0062104	NA	NA	NA
226	HMDB0032478	Polypropylene glycol (m w 1,200-3,000)	HMDB0032478	32881
227	HMDB0169074	NA	NA	NA
228	HMDB0151713	NA	NA	NA
229	HMDB0179995	NA	NA	NA
230	HMDB0133970	NA	NA	NA
231	HMDB0125538	NA	NA	NA
232	HMDB0125014	NA	NA	NA
233	HMDB0137138	NA	NA	NA
234	HMDB0132905	NA	NA	NA
235	HMDB0181055	NA	NA	NA
236	HMDB0059862	NA	NA	NA
237	HMDB0059880	NA	NA	NA
238	HMDB0034246	Furfuryl acetate	HMDB0034246	12170
239	HMDB0031735	Ethyl maltol	HMDB0031735	21059
240	HMDB0172014	NA	NA	NA
241	HMDB0137137	NA	NA	NA
242	HMDB0169073	NA	NA	NA
243	HMDB0000459	3-Methylcrotonylglycine	HMDB0000459	169485
244	HMDB0000959	Tiglylglycine	HMDB0000959	6441567
245	HMDB0094701	N-Acetylproline	HMDB0094701	66141
246	HMDB0014755	Paramethadione	HMDB0014755	8280
247	HMDB0034252	2-Aminoheptanedioic acid	HMDB0034252	101122
248	HMDB0036383	NA	NA	NA
249	HMDB0094717	NA	NA	NA
250	HMDB0002201	N-Carboxyethyl-g-aminobutyric acid	HMDB0002201	2572
251	HMDB0038594	NA	NA	NA
252	HMDB0061928	NA	NA	NA
253	HMDB0061156	NA	NA	NA
254	HMDB0000808	N-Butyrylglycine	HMDB0000808	88412
255	HMDB0003681	4-Acetamidobutanoic acid	HMDB0003681	18189
256	HMDB0060265	NA	NA	NA
257	HMDB0240326	NA	NA	NA
258	HMDB0012131	(S)-5-Amino-3-oxohexanoate	HMDB0012131	440077
259	HMDB0012151	2-Keto-6-aminocaproate	HMDB0012151	439954
260	HMDB0029425	L-cis-4-(Hydroxymethyl)-2-pyrrolidinecarboxylic acid	HMDB0029425	5318294
261	HMDB0001263	Allysine	HMDB0001263	207
262	HMDB0059595	(S)-2-amino-6-oxohexanoate	HMDB0059595	160603
263	HMDB0029426	L-trans-5-Hydroxy-2-piperidinecarboxylic acid	HMDB0029426	151730
264	HMDB0015127	Methyl aminolevulinate	HMDB0015127	157922
265	HMDB0094698	N-Propionylalanine	HMDB0094698	22788191
266	HMDB0000730	Isobutyrylglycine	HMDB0000730	10855600
267	HMDB0031515	(E)-8-Hydroxy-2-octene-4,6-dienoic acid	HMDB0031515	131751174
268	HMDB0040528	NA	NA	NA
269	HMDB0032612	3,4-Methylenedioxybenzaldehyde	HMDB0032612	8438
270	HMDB0032598	4-Hydroxyphthalide	HMDB0032598	12662077

271	HMDB0001587	Phenylglyoxylic acid	HMDB0001587	11915	C
272	HMDB0240370	NA	NA	NA	N
273	HMDB0167786	NA	NA	NA	N
274	HMDB0167787	NA	NA	NA	N
275	HMDB0004290	Isopyridoxal	HMDB0004290	440899	C
276	HMDB0034889	3alpha,4,7,7alpha-Tetrahydro-4-hydroxy-1H-isoindole-1,3(2H)-dione	HMDB0034889	86242667	
277	HMDB0034887	3alpha,4,5,7alpha-Tetrahydro-5-hydroxy-1H-isoindole-1,3(2H)-dione	HMDB0034887	130791563	
278	HMDB0181280	NA	NA	NA	N
279	HMDB0181253	NA	NA	NA	N
280	HMDB0001545	Pyridoxal	HMDB0001545	1050	C
281	HMDB0060374	NA	NA	NA	N
282	HMDB0155837	NA	NA	NA	N
283	HMDB0155839	NA	NA	NA	N
284	HMDB0155838	NA	NA	NA	N
285	HMDB0167055	NA	NA	NA	N
286	HMDB0167054	NA	NA	NA	N
287	HMDB0167052	NA	NA	NA	N
288	HMDB0167051	NA	NA	NA	N
289	HMDB0167053	NA	NA	NA	N
290	HMDB0164924	NA	NA	NA	N
291	HMDB0164923	NA	NA	NA	N
292	HMDB0164926	NA	NA	NA	N
293	HMDB0164925	NA	NA	NA	N
294	HMDB0164922	NA	NA	NA	N
295	HMDB0167056	NA	NA	NA	N
296	HMDB0038276	NA	NA	NA	N
297	HMDB0030471	1,4-Ipomeadiol	HMDB0030471	13186539	
298	HMDB0179173	NA	NA	NA	N
299	HMDB0179174	NA	NA	NA	N
300	HMDB0179175	NA	NA	NA	N
301	HMDB0179177	NA	NA	NA	N
302	HMDB0179176	NA	NA	NA	N
303	HMDB0000784	Azelaic acid	HMDB0000784	2266	C
304	HMDB0059760	NA	NA	NA	N
305	HMDB0059814	NA	NA	NA	N
306	HMDB0059783	NA	NA	NA	N
307	HMDB0059879	NA	NA	NA	N
308	HMDB0032387	(+/-)-Methyl 5-acetoxyhexanoate	HMDB0032387	526152	
309	HMDB0032200	cis- and trans-Ethyl 2,4-dimethyl-1,3-dioxolane-2-acetate	HMDB0032200	95392	
310	HMDB0032258	(+/-)-Ethyl 3-acetoxy-2-methylbutyrate	HMDB0032258	263620	
311	HMDB0036233	NA	NA	NA	N
312	HMDB0011717	Nonate	HMDB0011717	16058309	
313	HMDB0004816	FAPy-adenine	HMDB0004816	114926	C
314	HMDB0156374	NA	NA	NA	N
315	HMDB0160105	NA	NA	NA	N
316	HMDB0034440	(-)-1-(Methylthio)propyl 1-propenyl disulfide	HMDB0034440	88159528	
317	HMDB0033043	Methyl 1-(1-propenylthio)propyl disulfide	HMDB0033043	5352728	
318	HMDB0179372	NA	NA	NA	N
319	HMDB0179377	NA	NA	NA	N
320	HMDB0179381	NA	NA	NA	N
321	HMDB0179373	NA	NA	NA	N
322	HMDB0179369	NA	NA	NA	N
323	HMDB0179367	NA	NA	NA	N
324	HMDB0179365	NA	NA	NA	N
325	HMDB0165608	NA	NA	NA	N
326	HMDB0165604	NA	NA	NA	N
327	HMDB0165601	NA	NA	NA	N
328	HMDB0163719	NA	NA	NA	N
329	HMDB0163373	NA	NA	NA	N
330	HMDB0163369	NA	NA	NA	N
331	HMDB0163367	NA	NA	NA	N
332	HMDB0012209	Diethylphosphate	HMDB0012209	654	C
333	HMDB0001209	Allantoic acid	HMDB0001209	203	C
334	HMDB0175186	NA	NA	NA	N
335	HMDB0166750	NA	NA	NA	N
336	HMDB0040003	NA	NA	NA	N
337	HMDB0014023	para-Trifluoromethylphenol	HMDB0014023	67874	
338	HMDB0038379	NA	NA	NA	N
339	HMDB0183677	NA	NA	NA	N
340	HMDB0183678	NA	NA	NA	N
341	HMDB0140948	NA	NA	NA	N
342	HMDB0140949	NA	NA	NA	N
343	HMDB0137904	NA	NA	NA	N
344	HMDB0029865	Umbelliferone	HMDB0029865	5281426	C
345	HMDB0002149	3 Hydroxycoumarin	HMDB0002149	13650	
346	HMDB0136738	NA	NA	NA	N
347	HMDB0032398	Methyl n-formylanthranilate	HMDB0032398	162458	
348	HMDB0012884	Adrenochrome	HMDB0012884	5898	
349	HMDB0184242	NA	NA	NA	N
350	HMDB0032595	1-(4-Methoxyphenyl)-2-nitroethylene	HMDB0032595	697963	
351	HMDB0000714	Hippuric acid	HMDB0000714	464	C
352	HMDB0062583	NA	NA	NA	N
353	HMDB0000992	3-Succinoylpyridine	HMDB0000992	437	C
354	HMDB0038750	NA	NA	NA	N
355	HMDB0038336	NA	NA	NA	N
356	HMDB0000609	DL-Dopa	HMDB0000609	836	C
357	HMDB0000181	L-Dopa	HMDB0000181	6047	C

358	HMDB0061939	NA	NA	NA	M
359	HMDB0000704	Isoxanthopterin	HMDB0000704	135398700	C
360	HMDB0030408	2-Amino-3,4-dihydroxypentanedioic acid	HMDB0030408	22326306	C
361	HMDB0004822	Methyl bisnorbiotinyl ketone	HMDB0004822	21252323	M
362	HMDB0060733	NA	NA	NA	M
363	HMDB0133782	NA	NA	NA	M
364	HMDB0039427	NA	NA	NA	M
365	HMDB0060398	5-Hydroxyconiferyl alcohol	HMDB0060398	5282095	C
366	HMDB0062121	Hydroferulic acid	HMDB0062121	14340	M
367	HMDB0177595	NA	NA	NA	M
368	HMDB0166066	NA	NA	NA	M
369	HMDB0146633	NA	NA	NA	M
370	HMDB0125530	NA	NA	NA	M
371	HMDB0129339	NA	NA	NA	M
372	HMDB0130895	NA	NA	NA	M
373	HMDB0131427	NA	NA	NA	M
374	HMDB0133490	NA	NA	NA	M
375	HMDB0133530	NA	NA	NA	M
376	HMDB0134100	NA	NA	NA	M
377	HMDB0135753	NA	NA	NA	M
378	HMDB0140293	NA	NA	NA	M
379	HMDB0140897	NA	NA	NA	M
380	HMDB0146636	NA	NA	NA	M
381	HMDB0032365	Maltyl isobutyrate	HMDB0032365	3354132	M
382	HMDB0000434	Homoveratric acid	HMDB0000434	7139	M
383	HMDB0040637	NA	NA	NA	M
384	HMDB0029645	Xanthoxylin	HMDB0029645	66654	C
385	HMDB0037177	NA	NA	NA	M
386	HMDB0029648	2,4,5-Trimethoxybenzaldehyde	HMDB0029648	20525	M
387	HMDB0030571	(+)-3-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-1,2-propanediol	HMDB0030571	97807	M
388	HMDB0035721	(S)-Batatic acid	HMDB0035721	12300005	M
389	HMDB0040256	NA	NA	NA	M
390	HMDB0169507	NA	NA	NA	M
391	HMDB0169508	NA	NA	NA	M
392	HMDB0060735	NA	NA	NA	M
393	HMDB0131175	NA	NA	NA	M
394	HMDB0131138	NA	NA	NA	M
395	HMDB0172362	NA	NA	NA	M
396	HMDB0172365	NA	NA	NA	M
397	HMDB0172368	NA	NA	NA	M
398	HMDB0032581	1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	HMDB0032581	123197	M
399	HMDB0170507	NA	NA	NA	M
400	HMDB0170510	NA	NA	NA	M
401	HMDB0170509	NA	NA	NA	M
402	HMDB0170508	NA	NA	NA	M
403	HMDB0170505	NA	NA	NA	M
404	HMDB0170506	NA	NA	NA	M
405	HMDB0159583	NA	NA	NA	M
406	HMDB0004231	Pantothenol	HMDB0004231	4678	C
407	HMDB0015050	Phenformin	HMDB0015050	8249	C
408	HMDB0039045	NA	NA	NA	M
409	HMDB0128617	NA	NA	NA	M
410	HMDB0128616	NA	NA	NA	M
411	HMDB0039147	NA	NA	NA	M
412	HMDB0128619	NA	NA	NA	M
413	HMDB0032944	Coumarin-4-carboxylic acid	HMDB0032944	605378	M
414	HMDB0128618	NA	NA	NA	M
415	HMDB0161402	NA	NA	NA	M
416	HMDB0176483	NA	NA	NA	M
417	HMDB0161404	NA	NA	NA	M
418	HMDB0161405	NA	NA	NA	M
419	HMDB0161403	NA	NA	NA	M
420	HMDB0176481	NA	NA	NA	M
421	HMDB0176482	NA	NA	NA	M
422	HMDB0176484	NA	NA	NA	M
423	HMDB0176486	NA	NA	NA	M
424	HMDB0060328	1-Nitro-5,6-dihydroxy-dihydronaphthalene	HMDB0060328	11954052	C
425	HMDB0000978	4-(2-Aminophenyl)-2,4-dioxobutanoic acid	HMDB0000978	472	C
426	HMDB0176485	NA	NA	NA	M
427	HMDB0154376	NA	NA	NA	M
428	HMDB0150500	NA	NA	NA	M
429	HMDB0128032	NA	NA	NA	M
430	HMDB0140926	NA	NA	NA	M
431	HMDB0131194	NA	NA	NA	M
432	HMDB0150448	NA	NA	NA	M
433	HMDB0168704	NA	NA	NA	M
434	HMDB0166888	NA	NA	NA	M
435	HMDB0159052	NA	NA	NA	M
436	HMDB0168711	NA	NA	NA	M
437	HMDB0037264	NA	NA	NA	M
438	HMDB0168708	NA	NA	NA	M
439	HMDB0060026	NA	NA	NA	M
440	HMDB0040265	NA	NA	NA	M
441	HMDB0062463	NA	NA	NA	M
442	HMDB0031200	2-Methyl-2-[(1-oxo-2-propenyl)amino]-1-propanesulfonic acid	HMDB0031200	65360	M
443	HMDB0240343	NA	NA	NA	M
444	HMDB0030411	(2R,2'S)-Isobutene	HMDB0030411	14889929	M

445	HMDB0132268	NA	NA	NA	NA
446	HMDB0129256	NA	NA	NA	NA
447	HMDB0129255	NA	NA	NA	NA
448	HMDB0129254	NA	NA	NA	NA
449	HMDB0129253	NA	NA	NA	NA
450	HMDB0130385	NA	NA	NA	NA
451	HMDB0182823	NA	NA	NA	NA
452	HMDB0137155	NA	NA	NA	NA
453	HMDB0133478	NA	NA	NA	NA
454	HMDB0135671	NA	NA	NA	NA
455	HMDB0146416	NA	NA	NA	NA
456	HMDB0133535	NA	NA	NA	NA
457	HMDB0146430	NA	NA	NA	NA
458	HMDB0146433	NA	NA	NA	NA
459	HMDB0146438	NA	NA	NA	NA
460	HMDB0147110	NA	NA	NA	NA
461	HMDB0162409	NA	NA	NA	NA
462	HMDB0133526	NA	NA	NA	NA
463	HMDB0133519	NA	NA	NA	NA
464	HMDB0166245	NA	NA	NA	NA
465	HMDB0171692	NA	NA	NA	NA
466	HMDB0171691	NA	NA	NA	NA
467	HMDB0171693	NA	NA	NA	NA
468	HMDB0182824	NA	NA	NA	NA
469	HMDB0133511	NA	NA	NA	NA
470	HMDB0137159	NA	NA	NA	NA
471	HMDB0240450	NA	NA	NA	NA
472	HMDB0151839	NA	NA	NA	NA
473	HMDB0062054	NA	NA	NA	NA
474	HMDB0060737	NA	NA	NA	NA
475	HMDB0029187	5-(3',5')-Dihydroxyphenyl-gamma-valerolactone	HMDB0029187	131750805	
476	HMDB0029233	3,4-Dihydroxyphenylvaleric acid	HMDB0029233	49831816	
477	HMDB0013070	Sinapyl alcohol	HMDB0013070	5280507	
478	HMDB0036199	NA	NA	NA	
479	HMDB0033798	3-Methyl-1-(2,4,6-trihydroxyphenyl)-1-butanone	HMDB0033798	441269	
480	HMDB0034047	2'-Hydroxy-4',6'-dimethoxy-3'-methylacetophenone	HMDB0034047	326186	
481	HMDB0039428	NA	NA	NA	
482	HMDB0041406	NA	NA	NA	
483	HMDB0149142	NA	NA	NA	
484	HMDB0127493	NA	NA	NA	
485	HMDB0125803	NA	NA	NA	
486	HMDB0153819	NA	NA	NA	
487	HMDB0153812	NA	NA	NA	
488	HMDB0032496	Propyl propane thiosulfonate	HMDB0032496	358296	
489	HMDB0041572	NA	NA	NA	
490	HMDB0033601	Dihydrojasmonic acid	HMDB0033601	107126	
491	HMDB0035085	Vulgarole	HMDB0035085	101416067	
492	HMDB0029388	Cucurbitic acid	HMDB0029388	6123064	
493	HMDB0037326	NA	NA	NA	
494	HMDB0041613	NA	NA	NA	
495	HMDB0041614	NA	NA	NA	
496	HMDB0030143	Talaromycin A	HMDB0030143	13778220	
497	HMDB0000623	Dodecanedioic acid	HMDB0000623	12736	
498	HMDB0240291	NA	NA	NA	
499	HMDB0156230	NA	NA	NA	
500	HMDB0156233	NA	NA	NA	
501	HMDB0156232	NA	NA	NA	
502	HMDB0001004	Oxoamide	HMDB0001004	436	
503	HMDB0001427	5'-Hydroxycotinine	HMDB0001427	9815515	
504	HMDB0001411	Cotinine N-oxide	HMDB0001411	9815514	
505	HMDB0001390	Hydroxycotinine	HMDB0001390	107963	
506	HMDB0001324	N'-Hydroxymethylnorcotinine	HMDB0001324	25201488	
507	HMDB0156231	NA	NA	NA	
508	HMDB0171834	NA	NA	NA	
509	HMDB0171833	NA	NA	NA	
510	HMDB0171831	NA	NA	NA	
511	HMDB0171832	NA	NA	NA	
512	HMDB0240661	NA	NA	NA	
513	HMDB0015305	Phenobarbital	HMDB0015305	4763	
514	HMDB0014917	Nalidixic Acid	HMDB0014917	4421	
515	HMDB0176431	NA	NA	NA	
516	HMDB0176430	NA	NA	NA	
517	HMDB0031740	Methyl dihydrojasmonate	HMDB0031740	102861	
518	HMDB0040615	NA	NA	NA	
519	HMDB0037562	NA	NA	NA	
520	HMDB0037184	NA	NA	NA	
521	HMDB0002327	1,11-Undecanedicarboxylic acid	HMDB0002327	10458	
522	HMDB0036141	NA	NA	NA	
523	HMDB0014494	Minoxidil	HMDB0014494		
524	HMDB0062576	NA	NA	NA	
525	HMDB0001128	5-Phosphoribosylamine	HMDB0001128	439905	
526	HMDB0015017	Emtricitabine	HMDB0015017	60877	
527	HMDB0136645	NA	NA	NA	
528	HMDB0128628	NA	NA	NA	
529	HMDB0181730	NA	NA	NA	
530	HMDB0181727	NA	NA	NA	
531	HMDB0145929	NA	NA	NA	

532	HMDB0163172	NA	NA	NA	N
533	HMDB0163184	NA	NA	NA	N
534	HMDB0179514	NA	NA	NA	N
535	HMDB0179522	NA	NA	NA	N
536	HMDB0179520	NA	NA	NA	N
537	HMDB0179524	NA	NA	NA	N
538	HMDB0179531	NA	NA	NA	N
539	HMDB0179529	NA	NA	NA	N
540	HMDB0179537	NA	NA	NA	N
541	HMDB0179548	NA	NA	NA	N
542	HMDB0181724	NA	NA	NA	N
543	HMDB0133644	NA	NA	NA	N
544	HMDB0133738	NA	NA	NA	N
545	HMDB0133737	NA	NA	NA	N
546	HMDB0133735	NA	NA	NA	N
547	HMDB0133734	NA	NA	NA	N
548	HMDB0133658	NA	NA	NA	N
549	HMDB0133656	NA	NA	NA	N
550	HMDB0133640	NA	NA	NA	N
551	HMDB0133649	NA	NA	NA	N
552	HMDB0133651	NA	NA	NA	N
553	HMDB0133648	NA	NA	NA	N
554	HMDB0133646	NA	NA	NA	N
555	HMDB0133652	NA	NA	NA	N
556	HMDB0133741	NA	NA	NA	N
557	HMDB0170986	NA	NA	NA	N
558	HMDB0151265	NA	NA	NA	N
559	HMDB0151266	NA	NA	NA	N
560	HMDB0135653	NA	NA	NA	N
561	HMDB0135245	NA	NA	NA	N
562	HMDB0133774	NA	NA	NA	N
563	HMDB0133770	NA	NA	NA	N
564	HMDB0133772	NA	NA	NA	N
565	HMDB0133766	NA	NA	NA	N
566	HMDB0133768	NA	NA	NA	N
567	HMDB0133745	NA	NA	NA	N
568	HMDB0133740	NA	NA	NA	N
569	HMDB0179734	NA	NA	NA	N
570	HMDB0133642	NA	NA	NA	N
571	HMDB0133637	NA	NA	NA	N
572	HMDB0059983	NA	NA	NA	N
573	HMDB0174725	NA	NA	NA	N
574	HMDB0033041	1-(1-Propenylthio)propyl propyl disulfide	HMDB0033041	5352790	N
575	HMDB0040262	NA	NA	NA	N
576	HMDB0040243	NA	NA	NA	N
577	HMDB0033072	(E)-1-Propenyl 1-(propylthio)propyl disulfide	HMDB0033072	5352729	N
578	HMDB0163331	NA	NA	NA	N
579	HMDB0163333	NA	NA	NA	N
580	HMDB0163325	NA	NA	NA	N
581	HMDB0163327	NA	NA	NA	N
582	HMDB0032644	Maclurin	HMDB0032644	68213	C
583	HMDB0029463	Gentisein	HMDB0029463	5281635	C
584	HMDB0029218	Urolithin C	HMDB0029218	60198001	N
585	HMDB0142400	NA	NA	NA	N
586	HMDB0142398	NA	NA	NA	N
587	HMDB0142401	NA	NA	NA	N
588	HMDB0142399	NA	NA	NA	N
589	HMDB0168258	NA	NA	NA	N
590	HMDB0001228	L-Glutamic acid 5-phosphate	HMDB0001228	193475	C
591	HMDB0011170	gamma-Glutamylisoleucine	HMDB0011170	22885096	N
592	HMDB0029152	NA	NA	NA	N
593	HMDB0028928	Leucyl-Glutamate	HMDB0028928	7009630	N
594	HMDB0028906	Isoleucyl-Glutamate	HMDB0028906	7009625	N
595	HMDB0028823	Glutamylleucine	HMDB0028823	9856500	N
596	HMDB0028822	Glutamylisoleucine	HMDB0028822	9813855	N
597	HMDB0011171	gamma-Glutamylleucine	HMDB0011171	4524287	N
598	HMDB0029153	NA	NA	NA	N
599	HMDB0038256	NA	NA	NA	N
600	HMDB0112083	NA	NA	NA	N
601	HMDB0040302	NA	NA	NA	N
602	HMDB0036456	NA	NA	NA	N
603	HMDB0134724	NA	NA	NA	N
604	HMDB0137241	NA	NA	NA	N
605	HMDB0134736	NA	NA	NA	N
606	HMDB0134734	NA	NA	NA	N
607	HMDB0134732	NA	NA	NA	N
608	HMDB0134722	NA	NA	NA	N
609	HMDB0134719	NA	NA	NA	N
610	HMDB0134726	NA	NA	NA	N
611	HMDB0134730	NA	NA	NA	N
612	HMDB0134728	NA	NA	NA	N
613	HMDB0013248	Monoethylhexyl phthalic acid	HMDB0013248	20393	C
614	HMDB0033244	Dibutyl phthalate	HMDB0033244	3026	C
615	HMDB0001518	Alpha-CEHC	HMDB0001518	9943542	N
616	HMDB0133048	NA	NA	NA	N
617	HMDB0013835	Diisobutyl phthalate	HMDB0013835	6782	C
618	HMDB0133046	NA	NA	NA	N



619	HMDB0133045	NA	NA	NA	N
620	HMDB0133047	NA	NA	NA	N
621	HMDB0133085	NA	NA	NA	N
622	HMDB0133084	NA	NA	NA	N
623	HMDB0133087	NA	NA	NA	N
624	HMDB0133088	NA	NA	NA	N
625	HMDB0133086	NA	NA	NA	N
626	HMDB0133089	NA	NA	NA	N
627	HMDB0133090	NA	NA	NA	N
628	HMDB0133091	NA	NA	NA	N
629	HMDB0168847	NA	NA	NA	N
630	HMDB0032800	Feruloylcholine	HMDB0032800	54470093	
631	HMDB0031802	(Áš)-Metalaxyl	HMDB0031802	42586	C
632	HMDB0029033	Serylarginine	HMDB0029033	9856515	
633	HMDB0028718	Arginyl-Serine	HMDB0028718	9943142	
634	HMDB0167509	NA	NA	NA	N
635	HMDB0167513	NA	NA	NA	N
636	HMDB0167512	NA	NA	NA	N
637	HMDB0167511	NA	NA	NA	N
638	HMDB0135363	NA	NA	NA	N
639	HMDB0167508	NA	NA	NA	N
640	HMDB0034723	Encelin	HMDB0034723	329302	C
641	HMDB0030636	Batatasin III	HMDB0030636	10466989	
642	HMDB0032641	Batatasin IV	HMDB0032641	181271	C
643	HMDB0030731	3-(1,1-Dimethylallyl)herniarin	HMDB0030731	182622	
644	HMDB0038548	NA	NA	NA	N
645	HMDB0031925	5-Hydroxy-2-(5-methyl-1-oxo-4-hexenyl)benzofuran	HMDB0031925	10824187	
646	HMDB0029437	Nopalinic acid	HMDB0029437	4474580	C
647	HMDB0013161	2-Hexenoylcarnitine	HMDB0013161	53481638	
648	HMDB0136946	NA	NA	NA	N
649	HMDB0131641	NA	NA	NA	N
650	HMDB0124830	NA	NA	NA	N
651	HMDB0038399	NA	NA	NA	N
652	HMDB0039497	NA	NA	NA	N
653	HMDB0030549	5,6-Dihydro-4-methoxy-6-[2-(4-methoxyphenyl)ethyl]-2H-pyran-2-one	HMDB0030549	10084050	
654	HMDB0035596	Armexifolin	HMDB0035596	13918461	
655	HMDB0030691	Dihydrosuberanol	HMDB0030691	14077805	
656	HMDB0171819	NA	NA	NA	N
657	HMDB0015088	Rizatriptan	HMDB0015088	5078	
658	HMDB0240268	NA	NA	NA	N
659	HMDB0035910	Cedryl acetate	HMDB0035910	240121	
660	HMDB0037273	NA	NA	NA	N
661	HMDB0039630	NA	NA	NA	N
662	HMDB0037218	NA	NA	NA	N
663	HMDB0036153	NA	NA	NA	N
664	HMDB0037224	NA	NA	NA	N
665	HMDB0155179	NA	NA	NA	N
666	HMDB0186458	NA	NA	NA	N
667	HMDB0062415	NA	NA	NA	N
668	HMDB0240353	NA	NA	NA	N
669	HMDB0038957	NA	NA	NA	N
670	HMDB0000053	Androstenedione	HMDB0000053	6128	C
671	HMDB0155184	NA	NA	NA	N
672	HMDB0137366	NA	NA	NA	N
673	HMDB0137379	NA	NA	NA	N
674	HMDB0154824	NA	NA	NA	N
675	HMDB0154823	NA	NA	NA	N
676	HMDB0155183	NA	NA	NA	N
677	HMDB0154825	NA	NA	NA	N
678	HMDB0155181	NA	NA	NA	N
679	HMDB0154992	NA	NA	NA	N
680	HMDB0154837	NA	NA	NA	N
681	HMDB0154836	NA	NA	NA	N
682	HMDB0154826	NA	NA	NA	N
683	HMDB0155182	NA	NA	NA	N
684	HMDB0155187	NA	NA	NA	N
685	HMDB0174401	NA	NA	NA	N
686	HMDB0174398	NA	NA	NA	N
687	HMDB0174399	NA	NA	NA	N
688	HMDB0186115	NA	NA	NA	N
689	HMDB0000324	3a,16a-Dihydroxyandrosthenone	HMDB0000324		
690	HMDB0000309	3a,16b-Dihydroxyandrosthenone	HMDB0000309		
691	HMDB0174400	NA	NA	NA	N
692	HMDB0174397	NA	NA	NA	N
693	HMDB0169093	NA	NA	NA	N
694	HMDB0155186	NA	NA	NA	N
695	HMDB0155185	NA	NA	NA	N
696	HMDB0155188	NA	NA	NA	N
697	HMDB0155961	NA	NA	NA	N
698	HMDB0155960	NA	NA	NA	N
699	HMDB0155963	NA	NA	NA	N
700	HMDB0155962	NA	NA	NA	N
701	HMDB0155965	NA	NA	NA	N
702	HMDB0155966	NA	NA	NA	N
703	HMDB0156602	NA	NA	NA	N
704	HMDB0156968	NA	NA	NA	N
705	HMDB0159843	NA	NA	NA	N

706	HMDB0060339	11-Hydroxytestosterone	HMDB0060339	16118571	C
707	HMDB0000322	16-Oxoandrostenediol	HMDB0000322	53477682	
708	HMDB0000352	16a-Hydroxydehydroisoandrosterone	HMDB0000352	102030	C
709	HMDB0000388	3a,16-Dihydroxyandrostenone	HMDB0000388		
710	HMDB0003956	7a-Hydroxytestosterone	HMDB0003956	53477776	C
711	HMDB0004611	7a-Hydroxydehydroepiandrosterone	HMDB0004611	65517	C
712	HMDB0004624	7b-Hydroxydehydroepiandrosterone	HMDB0004624	9817954	
713	HMDB0006031	11-Ketoetiocholanolone	HMDB0006031	101850	C
714	HMDB0006259	6beta-Hydroxytestosterone	HMDB0006259	65543	C
715	HMDB0006769	19-Hydroxytestosterone	HMDB0006769	16395893	C
716	HMDB0039589	NA	NA	NA	N
717	HMDB0039735	NA	NA	NA	N
718	HMDB0031464	cis-[8]-Shogaol	HMDB0031464	6442560	
719	HMDB0012533	11beta-Hydroxytestosterone	HMDB0012533	9817955	
720	HMDB0012654	2beta-Hydroxytestosterone	HMDB0012654	53481514	C
721	HMDB0060089	NA	NA	NA	N
722	HMDB0028901	Isoleucyl-Arginine	HMDB0028901	9900561	
723	HMDB0028923	Leucyl-Arginine	HMDB0028923	3800205	
724	HMDB0028712	Arginyl-Isoleucine	HMDB0028712	7009553	
725	HMDB0028713	Arginyl-Leucine	HMDB0028713	6992563	
726	HMDB0002227	Capsaicin	HMDB0002227	1548943	C
727	HMDB0041142	NA	NA	NA	N
728	HMDB0032673	15-Octadecene-9,11,13-triynoic acid	HMDB0032673	131751279	
729	HMDB0000145	Estrone	HMDB0000145	5870	C
730	HMDB0029106	Tyrosyl-Hydroxyproline	HMDB0029106	69040603	
731	HMDB0028994	Phenylalanyl-Glutamate	HMDB0028994	4422358	
732	HMDB0028826	NA	NA	NA	N
733	HMDB0029156	Glutamylphenylalanine	HMDB0029156	18653118	
734	HMDB0028875	Hydroxypropyl-Tyrosine	HMDB0028875	61157166	
735	HMDB0029562	NA	NA	NA	N
736	HMDB0000594	gamma-Glutamylphenylalanine	HMDB0000594	111299	
737	HMDB0031865	4'-tert-Butyl-2',6'-dimethyl-3',5'-dinitroacetophenone	HMDB0031865	6669	
738	HMDB0001894	Aspartame	HMDB0001894	134601	C
739	HMDB0176554	NA	NA	NA	N
740	HMDB0038514	NA	NA	NA	N
741	HMDB0165238	NA	NA	NA	N
742	HMDB0165236	NA	NA	NA	N
743	HMDB0165237	NA	NA	NA	N
744	HMDB0165234	NA	NA	NA	N
745	HMDB0165235	NA	NA	NA	N
746	HMDB0137249	NA	NA	NA	N
747	HMDB0036558	NA	NA	NA	N
748	HMDB0033331	(E)-1-[4-Hydroxy-3-(3-methyl-1,3-butadienyl)phenyl]-2-(3,5-dihydroxyphenyl)ethylene	HMDB0033331	131751412	
749	HMDB0041305	NA	NA	NA	N
750	HMDB0147301	NA	NA	NA	N
751	HMDB0141182	NA	NA	NA	N
752	HMDB0138688	NA	NA	NA	N
753	HMDB0128993	NA	NA	NA	N
754	HMDB0141083	NA	NA	NA	N
755	HMDB0141084	NA	NA	NA	N
756	HMDB0141085	NA	NA	NA	N
757	HMDB0141172	NA	NA	NA	N
758	HMDB0141167	NA	NA	NA	N
759	HMDB0141166	NA	NA	NA	N
760	HMDB0141155	NA	NA	NA	N
761	HMDB0141154	NA	NA	NA	N
762	HMDB0141133	NA	NA	NA	N
763	HMDB0141132	NA	NA	NA	N
764	HMDB0141123	NA	NA	NA	N
765	HMDB0141109	NA	NA	NA	N
766	HMDB0141108	NA	NA	NA	N
767	HMDB0141086	NA	NA	NA	N
768	HMDB0147302	NA	NA	NA	N
769	HMDB0147300	NA	NA	NA	N
770	HMDB0128989	NA	NA	NA	N
771	HMDB0128986	NA	NA	NA	N
772	HMDB0128988	NA	NA	NA	N
773	HMDB0128987	NA	NA	NA	N
774	HMDB0128990	NA	NA	NA	N
775	HMDB0128991	NA	NA	NA	N
776	HMDB0141142	NA	NA	NA	N
777	HMDB0141168	NA	NA	NA	N
778	HMDB0141174	NA	NA	NA	N
779	HMDB0141173	NA	NA	NA	N
780	HMDB0146924	NA	NA	NA	N
781	HMDB0147032	NA	NA	NA	N
782	HMDB0147293	NA	NA	NA	N
783	HMDB0147294	NA	NA	NA	N
784	HMDB0147295	NA	NA	NA	N
785	HMDB0141135	NA	NA	NA	N
786	HMDB0141134	NA	NA	NA	N
787	HMDB0128992	NA	NA	NA	N
788	HMDB0147299	NA	NA	NA	N
789	HMDB0141065	NA	NA	NA	N
790	HMDB0141066	NA	NA	NA	N
791	HMDB0141073	NA	NA	NA	N
792	HMDB0141074	NA	NA	NA	N

793	HMDB0141110	NA	NA	NA
794	HMDB0141111	NA	NA	NA
795	HMDB0147298	NA	NA	NA
796	HMDB0147297	NA	NA	NA
797	HMDB0030600	4-(3-Methyl-1-butenyl)-3,3',4',5-tetrahydroxystilbene	HMDB0030600	131751057
798	HMDB0033535	Honyudisin	HMDB0033535	13965870
799	HMDB0037586	NA	NA	NA
800	HMDB0035478	2',3,4',5-Tetrahydroxy-4-prenylstilbene	HMDB0035478	5281724
801	HMDB0141087	NA	NA	NA
802	HMDB0038493	NA	NA	NA
803	HMDB0183234	NA	NA	NA
804	HMDB0006868	S-(2-Methylpropionyl)-dihydrolipoamide-E	HMDB0006868	47205290
805	HMDB0001495	Queuine	HMDB0001495	53477731
806	HMDB0014585	Entecavir	HMDB0014585	153941
807	HMDB0032676	Chloropanaxydiol	HMDB0032676	130756
808	HMDB0131316	NA	NA	NA
809	HMDB0030555	Tocopheronic acid	HMDB0030555	67764516
810	HMDB0094679	NA	NA	NA
811	HMDB0039134	NA	NA	NA
812	HMDB0028769	Cysteiny-Arginine	HMDB0028769	9835322
813	HMDB0028706	Arginyl-Cysteine	HMDB0028706	9943513
814	HMDB0013302	Phenylalanylphenylalanine	HMDB0013302	6993090
815	HMDB0015104	Alosetron	HMDB0015104	2099
816	HMDB0041061	NA	NA	NA
817	HMDB0033355	Dehydroaporphine	HMDB0033355	161899
818	HMDB0034110	Murrayacine	HMDB0034110	5319962
819	HMDB0002091	Isovalerylglucuronide	HMDB0002091	137383
820	HMDB0143217	NA	NA	NA
821	HMDB0126546	NA	NA	NA
822	HMDB0130798	NA	NA	NA
823	HMDB0175223	NA	NA	NA
824	HMDB0130839	NA	NA	NA
825	HMDB0167013	NA	NA	NA
826	HMDB0175227	NA	NA	NA
827	HMDB0175224	NA	NA	NA
828	HMDB0175219	NA	NA	NA
829	HMDB0175220	NA	NA	NA
830	HMDB0167016	NA	NA	NA
831	HMDB0167014	NA	NA	NA
832	HMDB0032650	Litcubinine	HMDB0032650	85190560
833	HMDB0240321	NA	NA	NA
834	HMDB0134791	NA	NA	NA
835	HMDB0134793	NA	NA	NA
836	HMDB0134794	NA	NA	NA
837	HMDB0134795	NA	NA	NA
838	HMDB0134798	NA	NA	NA
839	HMDB0134797	NA	NA	NA
840	HMDB0134796	NA	NA	NA
841	HMDB0139465	NA	NA	NA
842	HMDB0139466	NA	NA	NA
843	HMDB0139469	NA	NA	NA
844	HMDB0139468	NA	NA	NA
845	HMDB0139470	NA	NA	NA
846	HMDB0134792	NA	NA	NA
847	HMDB0033357	Laurelliptine	HMDB0033357	14539910
848	HMDB0030288	Muricinine	HMDB0030288	131750994
849	HMDB0040974	NA	NA	NA
850	HMDB0029365	Moupinamide	HMDB0029365	5280537
851	HMDB0036381	NA	NA	NA
852	HMDB0041245	NA	NA	NA
853	HMDB0170780	NA	NA	NA
854	HMDB0170778	NA	NA	NA
855	HMDB0170779	NA	NA	NA
856	HMDB0170777	NA	NA	NA
857	HMDB0170782	NA	NA	NA
858	HMDB0134789	NA	NA	NA
859	HMDB0134799	NA	NA	NA
860	HMDB0170781	NA	NA	NA
861	HMDB0144816	NA	NA	NA
862	HMDB0028972	Methionyl-Glutamate	HMDB0028972	7015689
863	HMDB0028825	Glutamylmethionine	HMDB0028825	6426949
864	HMDB0029155	NA	NA	NA
865	HMDB0034367	gamma-Glutamylmethionine	HMDB0034367	7009567
866	HMDB0184077	NA	NA	NA
867	HMDB0061158	NA	NA	NA
868	HMDB0030342	Platydesminium	HMDB0030342	5319758
869	HMDB0180633	NA	NA	NA
870	HMDB0184269	NA	NA	NA
871	HMDB0163735	NA	NA	NA
872	HMDB0163736	NA	NA	NA
873	HMDB0163741	NA	NA	NA
874	HMDB0163738	NA	NA	NA
875	HMDB0163742	NA	NA	NA
876	HMDB0183472	NA	NA	NA
877	HMDB0180632	NA	NA	NA
878	HMDB0159829	NA	NA	NA
879	HMDB0159828	NA	NA	NA

880	HMDB0158425	NA	NA	NA	N
881	HMDB0125509	NA	NA	NA	N
882	HMDB0060017	NA	NA	NA	N
883	HMDB0125508	NA	NA	NA	N
884	HMDB0187598	NA	NA	NA	N
885	HMDB0125512	NA	NA	NA	N
886	HMDB0125511	NA	NA	NA	N
887	HMDB0125510	NA	NA	NA	N
888	HMDB0173549	NA	NA	NA	N
889	HMDB0006211	2-(Formamido)-N1-(5-phospho-D-ribose)acetamidine	HMDB0006211	22833657	C
890	HMDB0015513	Fludiazepam	HMDB0015513	3369	
891	HMDB0135631	NA	NA	NA	N
892	HMDB0165472	NA	NA	NA	N
893	HMDB0165475	NA	NA	NA	N
894	HMDB0165471	NA	NA	NA	N
895	HMDB0164665	NA	NA	NA	N
896	HMDB0145822	NA	NA	NA	N
897	HMDB0130136	NA	NA	NA	N
898	HMDB0130132	NA	NA	NA	N
899	HMDB0130133	NA	NA	NA	N
900	HMDB0130129	NA	NA	NA	N
901	HMDB0130130	NA	NA	NA	N
902	HMDB0165476	NA	NA	NA	N
903	HMDB0126114	NA	NA	NA	N
904	HMDB0126113	NA	NA	NA	N
905	HMDB0126115	NA	NA	NA	N
906	HMDB0130019	NA	NA	NA	N
907	HMDB0130135	NA	NA	NA	N
908	HMDB0126116	NA	NA	NA	N
909	HMDB0060842	NA	NA	NA	N
910	HMDB0029104	Tyrosyl-Glutamate	HMDB0029104	7009628	
911	HMDB0028831	Glutamyltyrosine	HMDB0028831	515717	
912	HMDB0062553	NA	NA	NA	N
913	HMDB0011741	gamma-Glutamyltyrosine	HMDB0011741	94340	
914	HMDB0029161	NA	NA	NA	N
915	HMDB0176556	NA	NA	NA	N
916	HMDB0134716	NA	NA	NA	N
917	HMDB0131577	NA	NA	NA	N
918	HMDB0153683	NA	NA	NA	N
919	HMDB0150311	NA	NA	NA	N
920	HMDB0150310	NA	NA	NA	N
921	HMDB0030019	4'-Methoxymucidin	HMDB0030019	131750944	
922	HMDB0140842	NA	NA	NA	N
923	HMDB0131544	NA	NA	NA	N
924	HMDB0039858	NA	NA	NA	N
925	HMDB0039044	NA	NA	NA	N
926	HMDB0141056	NA	NA	NA	N
927	HMDB0138956	NA	NA	NA	N
928	HMDB0141101	NA	NA	NA	N
929	HMDB0141100	NA	NA	NA	N
930	HMDB0141102	NA	NA	NA	N
931	HMDB0141106	NA	NA	NA	N
932	HMDB0138955	NA	NA	NA	N
933	HMDB0138958	NA	NA	NA	N
934	HMDB0138953	NA	NA	NA	N
935	HMDB0140994	NA	NA	NA	N
936	HMDB0138959	NA	NA	NA	N
937	HMDB0138957	NA	NA	NA	N
938	HMDB0138952	NA	NA	NA	N
939	HMDB0141045	NA	NA	NA	N
940	HMDB0141057	NA	NA	NA	N
941	HMDB0141103	NA	NA	NA	N
942	HMDB0141107	NA	NA	NA	N
943	HMDB0141153	NA	NA	NA	N
944	HMDB0141152	NA	NA	NA	N
945	HMDB0141162	NA	NA	NA	N
946	HMDB0141161	NA	NA	NA	N
947	HMDB0141164	NA	NA	NA	N
948	HMDB0141163	NA	NA	NA	N
949	HMDB0141170	NA	NA	NA	N
950	HMDB0141169	NA	NA	NA	N
951	HMDB0141180	NA	NA	NA	N
952	HMDB0141181	NA	NA	NA	N
953	HMDB0146848	NA	NA	NA	N
954	HMDB0141151	NA	NA	NA	N
955	HMDB0141150	NA	NA	NA	N
956	HMDB0141146	NA	NA	NA	N
957	HMDB0141121	NA	NA	NA	N
958	HMDB0141120	NA	NA	NA	N
959	HMDB0141127	NA	NA	NA	N
960	HMDB0141129	NA	NA	NA	N
961	HMDB0141130	NA	NA	NA	N
962	HMDB0141128	NA	NA	NA	N
963	HMDB0141139	NA	NA	NA	N
964	HMDB0141140	NA	NA	NA	N
965	HMDB0141145	NA	NA	NA	N
966	HMDB0146849	NA	NA	NA	N

967	HMDB0138951	NA	NA	NA	N
968	HMDB0031744	Artocarbene	HMDB0031744	131751188	
969	HMDB0033310	Moracin C	HMDB0033310	155248	
970	HMDB0041298	NA	NA	NA	N
971	HMDB0138682	NA	NA	NA	N
972	HMDB0138954	NA	NA	NA	N
973	HMDB0036635	NA	NA	NA	N
974	HMDB0129039	NA	NA	NA	N
975	HMDB0141044	NA	NA	NA	N
976	HMDB0129035	NA	NA	NA	N
977	HMDB0129033	NA	NA	NA	N
978	HMDB0129032	NA	NA	NA	N
979	HMDB0129031	NA	NA	NA	N
980	HMDB0125548	NA	NA	NA	N
981	HMDB0125546	NA	NA	NA	N
982	HMDB0129034	NA	NA	NA	N
983	HMDB0125547	NA	NA	NA	N
984	HMDB0125543	NA	NA	NA	N
985	HMDB0125544	NA	NA	NA	N
986	HMDB0125545	NA	NA	NA	N
987	HMDB0129037	NA	NA	NA	N
988	HMDB0129036	NA	NA	NA	N
989	HMDB0146850	NA	NA	NA	N
990	HMDB0149106	NA	NA	NA	N
991	HMDB0141171	NA	NA	NA	N
992	HMDB0141165	NA	NA	NA	N
993	HMDB0129038	NA	NA	NA	N
994	HMDB0140114	NA	NA	NA	N
995	HMDB0140118	NA	NA	NA	N
996	HMDB0140117	NA	NA	NA	N
997	HMDB0140115	NA	NA	NA	N
998	HMDB0140116	NA	NA	NA	N
999	HMDB0140204	NA	NA	NA	N
1000	HMDB0141104	NA	NA	NA	N
1001	HMDB0141131	NA	NA	NA	N
1002	HMDB0141141	NA	NA	NA	N
1003	HMDB0040670	NA	NA	NA	N
1004	HMDB0000839	Pentaporphyrin I	HMDB0000839		C
1005	HMDB0015412	Sulfacytine	HMDB0015412	5322	
1006	HMDB0037841	NA	NA	NA	N
1007	HMDB0015585	Chlophedianol	HMDB0015585	2795	
1008	HMDB0156500	NA	NA	NA	N
1009	HMDB0154791	NA	NA	NA	N
1010	HMDB0154792	NA	NA	NA	N
1011	HMDB0010329	Dopamine glucuronide	HMDB0010329	3082490	
1012	HMDB0147117	NA	NA	NA	N
1013	HMDB0030704	Taxiphyllin	HMDB0030704	4475719	C
1014	HMDB0060471	Dhurrin	HMDB0060471	161355	C
1015	HMDB0172671	NA	NA	NA	N
1016	HMDB0172687	NA	NA	NA	N
1017	HMDB0172683	NA	NA	NA	N
1018	HMDB0172672	NA	NA	NA	N
1019	HMDB0172684	NA	NA	NA	N
1020	HMDB0172661	NA	NA	NA	N
1021	HMDB0172659	NA	NA	NA	N
1022	HMDB0172658	NA	NA	NA	N
1023	HMDB0172670	NA	NA	NA	N
1024	HMDB0172679	NA	NA	NA	N
1025	HMDB0172660	NA	NA	NA	N
1026	HMDB0172680	NA	NA	NA	N
1027	HMDB0172686	NA	NA	NA	N
1028	HMDB0005765	Ophthalmic acid	HMDB0005765	7018721	C
1029	HMDB0132282	NA	NA	NA	N
1030	HMDB0135711	NA	NA	NA	N
1031	HMDB0135708	NA	NA	NA	N
1032	HMDB0135702	NA	NA	NA	N
1033	HMDB0135701	NA	NA	NA	N
1034	HMDB0127756	NA	NA	NA	N
1035	HMDB0127760	NA	NA	NA	N
1036	HMDB0132598	NA	NA	NA	N
1037	HMDB0132579	NA	NA	NA	N
1038	HMDB0240447	NA	NA	NA	N
1039	HMDB0135712	NA	NA	NA	N
1040	HMDB0135714	NA	NA	NA	N
1041	HMDB0182831	NA	NA	NA	N
1042	HMDB0125823	NA	NA	NA	N
1043	HMDB0182829	NA	NA	NA	N
1044	HMDB0171701	NA	NA	NA	N
1045	HMDB0171698	NA	NA	NA	N
1046	HMDB0162417	NA	NA	NA	N
1047	HMDB0135715	NA	NA	NA	N
1048	HMDB0240452	NA	NA	NA	N
1049	HMDB0059975	NA	NA	NA	N
1050	HMDB0059976	NA	NA	NA	N
1051	HMDB0148095	NA	NA	NA	N
1052	HMDB0152222	NA	NA	NA	N
1053	HMDB0041396	NA	NA	NA	N

1054	HMDB0174948	NA	NA		
1055	HMDB0174947	NA	NA		
1056	HMDB0041395	NA	NA		
1057	HMDB0030643	Blighinone	HMDB0030643		
1058	HMDB0142064	NA	NA		
1059	HMDB0130058	NA	NA		
1060	HMDB0130051	NA	NA		
1061	HMDB0130094	NA	NA		
1062	HMDB0130093	NA	NA		
1063	HMDB0135800	NA	NA		
1064	HMDB0146640	NA	NA		
1065	HMDB0146641	NA	NA		
1066	HMDB0146639	NA	NA		
1067	HMDB0130084	NA	NA		
1068	HMDB0130090	NA	NA		
1069	HMDB0130089	NA	NA		
1070	HMDB0130088	NA	NA		
1071	HMDB0130083	NA	NA		
1072	HMDB0130079	NA	NA		
1073	HMDB0130080	NA	NA		
1074	HMDB0130081	NA	NA		
1075	HMDB0130075	NA	NA		
1076	HMDB0130074	NA	NA		
1077	HMDB0130071	NA	NA		
1078	HMDB0130072	NA	NA		
1079	HMDB0011680	Inosine 2',3'-cyclic phosphate	HMDB0011680	12358625	
1080	HMDB0014910	Malathion	HMDB0014910	4004	
1081	HMDB0167583	NA	NA		
1082	HMDB0163428	NA	NA		
1083	HMDB0163429	NA	NA		
1084	HMDB0040599	NA	NA		
1085	HMDB0163414	NA	NA		
1086	HMDB0163412	NA	NA		
1087	HMDB0163416	NA	NA		
1088	HMDB0163420	NA	NA		
1089	HMDB0160742	NA	NA		
1090	HMDB0163418	NA	NA		
1091	HMDB0160743	NA	NA		
1092	HMDB0180025	NA	NA		
1093	HMDB0169077	NA	NA		
1094	HMDB0181056	NA	NA		
1095	HMDB0180024	NA	NA		
1096	HMDB0128037	NA	NA		
1097	HMDB0128036	NA	NA		
1098	HMDB0151740	NA	NA		
1099	HMDB0151741	NA	NA		
1100	HMDB0169076	NA	NA		
1101	HMDB0169081	NA	NA		
1102	HMDB0169082	NA	NA		
1103	HMDB0240397	NA	NA		
1104	HMDB0060573	NA	NA		
1105	HMDB0060991	NA	NA		
1106	HMDB0014975	Progabide	HMDB0014975	5361323	
1107	HMDB0061183	NA	NA		
1108	HMDB0061184	NA	NA		
1109	HMDB0014955	Rosoxacin	HMDB0014955	287180	
1110	HMDB0143264	NA	NA		
1111	HMDB0143263	NA	NA		
1112	HMDB0143260	NA	NA		
1113	HMDB0172074	NA	NA		
1114	HMDB0143261	NA	NA		
1115	HMDB0130849	NA	NA		
1116	HMDB0130848	NA	NA		
1117	HMDB0143266	NA	NA		
1118	HMDB0143267	NA	NA		
1119	HMDB0159993	NA	NA		
1120	HMDB0159992	NA	NA		
1121	HMDB0172070	NA	NA		
1122	HMDB0172072	NA	NA		
1123	HMDB0161208	NA	NA		
1124	HMDB0161207	NA	NA		
1125	HMDB0161210	NA	NA		
1126	HMDB0130846	NA	NA		
1127	HMDB0130845	NA	NA		
1128	HMDB0130800	NA	NA		
1129	HMDB0130803	NA	NA		
1130	HMDB0130802	NA	NA		
1131	HMDB0130805	NA	NA		
1132	HMDB0130806	NA	NA		
1133	HMDB0130843	NA	NA		
1134	HMDB0130844	NA	NA		
1135	HMDB0130841	NA	NA		
1136	HMDB0130801	NA	NA		
1137	HMDB0130840	NA	NA		
1138	HMDB0181159	NA	NA		
1139	HMDB0181157	NA	NA		
1140	HMDB0041271	NA	NA		

1141	HMDB0125177	NA	NA	NA
1142	HMDB0135642	NA	NA	NA
1143	HMDB0166073	NA	NA	NA
1144	HMDB0166120	NA	NA	NA
1145	HMDB0029497	Dimethyl fukiic acid	HMDB0029497	131750879
1146	HMDB0240460	NA	NA	NA
1147	HMDB0240458	NA	NA	NA
1148	HMDB0167628	NA	NA	NA
1149	HMDB0125107	NA	NA	NA
1150	HMDB0186745	NA	NA	NA
1151	HMDB0167627	NA	NA	NA
1152	HMDB0005037	Sumatriptan	HMDB0005037	5358
1153	HMDB0003409	Berberine	HMDB0003409	2353
1154	HMDB0035919	Corchorifatty acid F	HMDB0035919	44559173
1155	HMDB0040611	NA	NA	NA
1156	HMDB0038483	NA	NA	NA
1157	HMDB0061377	NA	NA	NA
1158	HMDB0029885	Sorbitan laurate	HMDB0029885	347468
1159	HMDB0181210	NA	NA	NA
1160	HMDB0181224	NA	NA	NA
1161	HMDB0181213	NA	NA	NA
1162	HMDB0181217	NA	NA	NA
1163	HMDB0181221	NA	NA	NA
1164	HMDB0181228	NA	NA	NA
1165	HMDB0181603	NA	NA	NA
1166	HMDB0181232	NA	NA	NA
1167	HMDB0181204	NA	NA	NA
1168	HMDB0029160	gamma-Glutamyltryptophan	HMDB0029160	3989307
1169	HMDB0028830	Glutamyltryptophan	HMDB0028830	100094
1170	HMDB0094678	NA	NA	NA
1171	HMDB0181186	NA	NA	NA
1172	HMDB0181193	NA	NA	NA
1173	HMDB0181201	NA	NA	NA
1174	HMDB0181197	NA	NA	NA
1175	HMDB0181190	NA	NA	NA
1176	HMDB0029082	Tryptophyl-Glutamate	HMDB0029082	7009663
1177	HMDB0165812	NA	NA	NA
1178	HMDB0173727	NA	NA	NA
1179	HMDB0030344	(R)-Pronuciferine	HMDB0030344	628376
1180	HMDB0034371	Piperettine	HMDB0034371	10244953
1181	HMDB0029858	Lansimide 3	HMDB0029858	85584195
1182	HMDB0029378	(-)-Thebaine	HMDB0029378	408120
1183	HMDB0039632	NA	NA	NA
1184	HMDB0034592	Lansamide 4	HMDB0034592	10519101
1185	HMDB0139539	NA	NA	NA
1186	HMDB0015113	Lomefloxacin	HMDB0015113	68624
1187	HMDB0168226	NA	NA	NA
1188	HMDB0168227	NA	NA	NA
1189	HMDB0001517	AICAR	HMDB0001517	65110
1190	HMDB0003841	5-Amino-6-(5'-phosphoribitylamino)uracil	HMDB0003841	333
1191	HMDB0140953	NA	NA	NA
1192	HMDB0183683	NA	NA	NA
1193	HMDB0183684	NA	NA	NA
1194	HMDB0183680	NA	NA	NA
1195	HMDB0183681	NA	NA	NA
1196	HMDB0137928	NA	NA	NA
1197	HMDB0140950	NA	NA	NA
1198	HMDB0140952	NA	NA	NA
1199	HMDB0136745	NA	NA	NA
1200	HMDB0240564	NA	NA	NA
1201	HMDB0034621	2-O-Acetyl-trans-coutaric acid	HMDB0034621	10382471
1202	HMDB0140951	NA	NA	NA
1203	HMDB0135270	NA	NA	NA
1204	HMDB0135269	NA	NA	NA
1205	HMDB0134094	NA	NA	NA
1206	HMDB0134090	NA	NA	NA
1207	HMDB0134089	NA	NA	NA
1208	HMDB0134084	NA	NA	NA
1209	HMDB0134085	NA	NA	NA
1210	HMDB0134086	NA	NA	NA
1211	HMDB0132560	NA	NA	NA
1212	HMDB0132558	NA	NA	NA
1213	HMDB0127961	NA	NA	NA
1214	HMDB0128007	NA	NA	NA
1215	HMDB0132559	NA	NA	NA
1216	HMDB0134093	NA	NA	NA
1217	HMDB0135464	NA	NA	NA
1218	HMDB0135463	NA	NA	NA
1219	HMDB0135271	NA	NA	NA
1220	HMDB0128006	NA	NA	NA
1221	HMDB0165531	NA	NA	NA
1222	HMDB0165529	NA	NA	NA
1223	HMDB0165530	NA	NA	NA
1224	HMDB0146678	NA	NA	NA
1225	HMDB0146679	NA	NA	NA
1226	HMDB0140965	NA	NA	NA
1227	HMDB0140963	NA	NA	NA

1228	HMDB0140964	NA	NA	NA	NA
1229	HMDB0140959	NA	NA	NA	NA
1230	HMDB0140958	NA	NA	NA	NA
1231	HMDB0240448	NA	NA	NA	NA
1232	HMDB0127959	NA	NA	NA	NA
1233	HMDB0124958	NA	NA	NA	NA
1234	HMDB0124957	NA	NA	NA	NA
1235	HMDB0041705	NA	NA	NA	NA
1236	HMDB0134095	NA	NA	NA	NA
1237	HMDB0041709	NA	NA	NA	NA
1238	HMDB0124959	NA	NA	NA	NA
1239	HMDB0125407	NA	NA	NA	NA
1240	HMDB0127960	NA	NA	NA	NA
1241	HMDB0041707	NA	NA	NA	NA
1242	HMDB0126408	NA	NA	NA	NA
1243	HMDB0126409	NA	NA	NA	NA
1244	HMDB0126407	NA	NA	NA	NA
1245	HMDB0125827	NA	NA	NA	NA
1246	HMDB0125828	NA	NA	NA	NA
1247	HMDB0125408	NA	NA	NA	NA
1248	HMDB0166054	NA	NA	NA	NA
1249	HMDB0166052	NA	NA	NA	NA
1250	HMDB0030398	N-(Carbomethoxyacetyl)-4-S-chlorotryptophan	HMDB0030398	131751010	NA
1251	HMDB0041813	NA	NA	NA	NA
1252	HMDB0138082	NA	NA	NA	NA
1253	HMDB0138080	NA	NA	NA	NA
1254	HMDB0136521	NA	NA	NA	NA
1255	HMDB0136520	NA	NA	NA	NA
1256	HMDB0132925	NA	NA	NA	NA
1257	HMDB0132923	NA	NA	NA	NA
1258	HMDB0165006	NA	NA	NA	NA
1259	HMDB0138081	NA	NA	NA	NA
1260	HMDB0148997	NA	NA	NA	NA
1261	HMDB0148996	NA	NA	NA	NA
1262	HMDB0060418	6-Thioxanthine 5'-monophosphate	HMDB0060418	3081384	NA
1263	HMDB0060792	NA	NA	NA	NA
1264	HMDB0151501	NA	NA	NA	NA
1265	HMDB0151517	NA	NA	NA	NA
1266	HMDB0150296	NA	NA	NA	NA
1267	HMDB0152589	NA	NA	NA	NA
1268	HMDB0152593	NA	NA	NA	NA
1269	HMDB0153406	NA	NA	NA	NA
1270	HMDB0174954	NA	NA	NA	NA
1271	HMDB0174987	NA	NA	NA	NA
1272	HMDB0174990	NA	NA	NA	NA
1273	HMDB0180751	NA	NA	NA	NA
1274	HMDB0148683	NA	NA	NA	NA
1275	HMDB0147540	NA	NA	NA	NA
1276	HMDB0146310	NA	NA	NA	NA
1277	HMDB0133341	NA	NA	NA	NA
1278	HMDB0041778	NA	NA	NA	NA
1279	HMDB0041777	NA	NA	NA	NA
1280	HMDB0133325	NA	NA	NA	NA
1281	HMDB0137323	NA	NA	NA	NA
1282	HMDB0138831	NA	NA	NA	NA
1283	HMDB0146287	NA	NA	NA	NA
1284	HMDB0131969	NA	NA	NA	NA
1285	HMDB0133834	NA	NA	NA	NA
1286	HMDB0133334	NA	NA	NA	NA
1287	HMDB0061052	NA	NA	NA	NA
1288	HMDB0061053	NA	NA	NA	NA
1289	HMDB0136942	NA	NA	NA	NA
1290	HMDB0133857	NA	NA	NA	NA
1291	HMDB0136046	NA	NA	NA	NA
1292	HMDB0135999	NA	NA	NA	NA
1293	HMDB0141379	NA	NA	NA	NA
1294	HMDB0141380	NA	NA	NA	NA
1295	HMDB0153296	NA	NA	NA	NA
1296	HMDB0152059	NA	NA	NA	NA
1297	HMDB0152047	NA	NA	NA	NA
1298	HMDB0151485	NA	NA	NA	NA
1299	HMDB0151474	NA	NA	NA	NA
1300	HMDB0146318	NA	NA	NA	NA
1301	HMDB0146307	NA	NA	NA	NA
1302	HMDB0141384	NA	NA	NA	NA
1303	HMDB0151475	NA	NA	NA	NA
1304	HMDB0132182	NA	NA	NA	NA
1305	HMDB0124896	NA	NA	NA	NA
1306	HMDB0126581	NA	NA	NA	NA
1307	HMDB0126582	NA	NA	NA	NA
1308	HMDB0126589	NA	NA	NA	NA
1309	HMDB0127519	NA	NA	NA	NA
1310	HMDB0128810	NA	NA	NA	NA
1311	HMDB0128836	NA	NA	NA	NA
1312	HMDB0128835	NA	NA	NA	NA
1313	HMDB0128841	NA	NA	NA	NA
1314	HMDB0130710	NA	NA	NA	NA



1315	HMDB0130718	NA	NA	NA
1316	HMDB0130735	NA	NA	NA
1317	HMDB0132169	NA	NA	NA
1318	HMDB0132173	NA	NA	NA
1319	HMDB0132174	NA	NA	NA
1320	HMDB0037810	NA	NA	NA
1321	HMDB0014633	Buspirone	HMDB0014633	2477
1322	HMDB0062683	NA	NA	NA
1323	HMDB0187401	NA	NA	NA
1324	HMDB0184339	NA	NA	NA
1325	HMDB0062748	NA	NA	NA
1326	HMDB0183704	NA	NA	NA
1327	HMDB0005099	Thromboxane B3	HMDB0005099	6438711
1328	HMDB0003247	20-Hydroxy-PGE2	HMDB0003247	5283034
1329	HMDB0012635	20-dihydroxyleukotriene B4	HMDB0012635	53481509
1330	HMDB0012110	5(6)-Epoxy Prostaglandin E1	HMDB0012110	53481368
1331	HMDB0012633	20-COOH-10,11-dihydro-LTB4	HMDB0012633	53481507
1332	HMDB0036854	NA	NA	NA
1333	HMDB0003235	Prostaglandin G2	HMDB0003235	5280883
1334	HMDB0001908	19-Hydroxy-PGE2	HMDB0001908	5283038
1335	HMDB0001979	6,15-Diketo,13,14-dihydro-PGF1a	HMDB0001979	5283033
1336	HMDB0004241	6-Ketoprostaglandin E1	HMDB0004241	5280889
1337	HMDB0004242	11-Dehydro-thromboxane B2	HMDB0004242	53477781
1338	HMDB0034678	Cinnacsiol D2	HMDB0034678	75144798
1339	HMDB0014708	Cinnarizine	HMDB0014708	2761
1340	HMDB0014415	Isradipine	HMDB0014415	3784
1341	HMDB0160682	NA	NA	NA
1342	HMDB0040706	NA	NA	NA
1343	HMDB0039964	NA	NA	NA
1344	HMDB0164285	NA	NA	NA
1345	HMDB0041552	NA	NA	NA
1346	HMDB0177109	NA	NA	NA
1347	HMDB0014794	Trazodone	HMDB0014794	5533
1348	HMDB0033216	(2R,6x)-7-Methyl-3-methylene-1,2,6,7-octanetetrol 2-glucoside	HMDB0033216	85242164
1349	HMDB0039976	NA	NA	NA
1350	HMDB0039975	NA	NA	NA
1351	HMDB0015267	Carvedilol	HMDB0015267	2585
1352	HMDB0156420	NA	NA	NA
1353	HMDB0185234	NA	NA	NA
1354	HMDB0037444	NA	NA	NA
1355	HMDB0038876	NA	NA	NA
1356	HMDB0033611	Licocoumarin A	HMDB0033611	5324358
1357	HMDB0030778	Mammea A/AB	HMDB0030778	6483317
1358	HMDB0034917	Xanthohumol E	HMDB0034917	25245324
1359	HMDB0033536	Honyucitrin	HMDB0033536	44257865
1360	HMDB0030628	Rubraflavone A	HMDB0030628	21721909
1361	HMDB0034269	Mammeisin	HMDB0034269	5281419
1362	HMDB0030779	Mammea A/BA	HMDB0030779	5748555
1363	HMDB0033099	Kanzonol Z	HMDB0033099	131751372
1364	HMDB0030780	Mammea A/BB	HMDB0030780	11750116
1365	HMDB0038875	NA	NA	NA
1366	HMDB0030844	6,7-Dimethoxy-7-epirosmanol	HMDB0030844	131751086
1367	HMDB0031933	11,12-Dihydroxy-7,14-dimethoxy-8,11,13-abietatrien-20,6-olide	HMDB0031933	76401227
1368	HMDB0035922	Nigakihemiacetal B	HMDB0035922	283906
1369	HMDB0035206	Bakkenolide B	HMDB0035206	101289733
1370	HMDB0240335	NA	NA	NA
1371	HMDB0240334	NA	NA	NA
1372	HMDB0173904	NA	NA	NA
1373	HMDB0173896	NA	NA	NA
1374	HMDB0173898	NA	NA	NA
1375	HMDB0173900	NA	NA	NA
1376	HMDB0173906	NA	NA	NA
1377	HMDB0173912	NA	NA	NA
1378	HMDB0173914	NA	NA	NA
1379	HMDB0173902	NA	NA	NA
1380	HMDB0034588	Butyl 3-O-caffeoylquininate	HMDB0034588	131751587
1381	HMDB0175203	NA	NA	NA
1382	HMDB0170859	NA	NA	NA
1383	HMDB0154135	NA	NA	NA
1384	HMDB0162525	NA	NA	NA
1385	HMDB0175193	NA	NA	NA
1386	HMDB0175196	NA	NA	NA
1387	HMDB0175199	NA	NA	NA
1388	HMDB0034447	Ptelatoside B	HMDB0034447	13964509
1389	HMDB0175200	NA	NA	NA
1390	HMDB0176844	NA	NA	NA
1391	HMDB0176847	NA	NA	NA
1392	HMDB0139783	NA	NA	NA
1393	HMDB0139784	NA	NA	NA
1394	HMDB0139785	NA	NA	NA
1395	HMDB0139786	NA	NA	NA
1396	HMDB0139788	NA	NA	NA
1397	HMDB0139787	NA	NA	NA
1398	HMDB0139789	NA	NA	NA
1399	HMDB0139782	NA	NA	NA
1400	HMDB0139790	NA	NA	NA
1401	HMDB0139792	NA	NA	NA

1402	HMDB0139791	NA	NA	NA	N
1403	HMDB0139793	NA	NA	NA	N
1404	HMDB0139794	NA	NA	NA	N
1405	HMDB0139781	NA	NA	NA	N
1406	HMDB0130011	NA	NA	NA	N
1407	HMDB0130785	NA	NA	NA	N
1408	HMDB0130789	NA	NA	NA	N
1409	HMDB0130790	NA	NA	NA	N
1410	HMDB0131729	NA	NA	NA	N
1411	HMDB0131730	NA	NA	NA	N
1412	HMDB0131732	NA	NA	NA	N
1413	HMDB0131731	NA	NA	NA	N
1414	HMDB0131733	NA	NA	NA	N
1415	HMDB0133384	NA	NA	NA	N
1416	HMDB0130787	NA	NA	NA	N
1417	HMDB0130788	NA	NA	NA	N
1418	HMDB0130012	NA	NA	NA	N
1419	HMDB0130013	NA	NA	NA	N
1420	HMDB0130214	NA	NA	NA	N
1421	HMDB0130215	NA	NA	NA	N
1422	HMDB0130247	NA	NA	NA	N
1423	HMDB0130246	NA	NA	NA	N
1424	HMDB0130245	NA	NA	NA	N
1425	HMDB0130248	NA	NA	NA	N
1426	HMDB0130786	NA	NA	NA	N
1427	HMDB0133385	NA	NA	NA	N
1428	HMDB0133386	NA	NA	NA	N
1429	HMDB0137579	NA	NA	NA	N
1430	HMDB0137578	NA	NA	NA	N
1431	HMDB0137585	NA	NA	NA	N
1432	HMDB0137586	NA	NA	NA	N
1433	HMDB0137587	NA	NA	NA	N
1434	HMDB0137596	NA	NA	NA	N
1435	HMDB0137594	NA	NA	NA	N
1436	HMDB0137595	NA	NA	NA	N
1437	HMDB0137602	NA	NA	NA	N
1438	HMDB0137577	NA	NA	NA	N
1439	HMDB0137571	NA	NA	NA	N
1440	HMDB0133578	NA	NA	NA	N
1441	HMDB0133579	NA	NA	NA	N
1442	HMDB0134577	NA	NA	NA	N
1443	HMDB0134576	NA	NA	NA	N
1444	HMDB0134901	NA	NA	NA	N
1445	HMDB0134899	NA	NA	NA	N
1446	HMDB0134898	NA	NA	NA	N
1447	HMDB0137569	NA	NA	NA	N
1448	HMDB0137570	NA	NA	NA	N
1449	HMDB0137603	NA	NA	NA	N
1450	HMDB0129979	NA	NA	NA	N
1451	HMDB0132732	NA	NA	NA	N
1452	HMDB0127132	NA	NA	NA	N
1453	HMDB0128082	NA	NA	NA	N
1454	HMDB0128087	NA	NA	NA	N
1455	HMDB0128085	NA	NA	NA	N
1456	HMDB0128086	NA	NA	NA	N
1457	HMDB0128105	NA	NA	NA	N
1458	HMDB0128104	NA	NA	NA	N
1459	HMDB0129299	NA	NA	NA	N
1460	HMDB0129977	NA	NA	NA	N
1461	HMDB0125410	NA	NA	NA	N
1462	HMDB0125411	NA	NA	NA	N
1463	HMDB0128083	NA	NA	NA	N
1464	HMDB0125404	NA	NA	NA	N
1465	HMDB0125405	NA	NA	NA	N
1466	HMDB0129978	NA	NA	NA	N
1467	HMDB0150621	NA	NA	NA	N
1468	HMDB0152658	NA	NA	NA	N
1469	HMDB0152659	NA	NA	NA	N
1470	HMDB0152660	NA	NA	NA	N
1471	HMDB0152710	NA	NA	NA	N
1472	HMDB0152711	NA	NA	NA	N
1473	HMDB0152712	NA	NA	NA	N
1474	HMDB0154230	NA	NA	NA	N
1475	HMDB0166453	NA	NA	NA	N
1476	HMDB0166457	NA	NA	NA	N
1477	HMDB0152565	NA	NA	NA	N
1478	HMDB0152566	NA	NA	NA	N
1479	HMDB0150653	NA	NA	NA	N
1480	HMDB0150654	NA	NA	NA	N
1481	HMDB0150657	NA	NA	NA	N
1482	HMDB0150656	NA	NA	NA	N
1483	HMDB0150655	NA	NA	NA	N
1484	HMDB0151701	NA	NA	NA	N
1485	HMDB0151700	NA	NA	NA	N
1486	HMDB0152535	NA	NA	NA	N
1487	HMDB0152564	NA	NA	NA	N
1488	HMDB0166455	NA	NA	NA	N

1489	HMDB0166454	NA	NA	NA	N
1490	HMDB0174518	NA	NA	NA	N
1491	HMDB0174516	NA	NA	NA	N
1492	HMDB0176663	NA	NA	NA	N
1493	HMDB0176664	NA	NA	NA	N
1494	HMDB0177372	NA	NA	NA	N
1495	HMDB0177371	NA	NA	NA	N
1496	HMDB0174517	NA	NA	NA	N
1497	HMDB0174513	NA	NA	NA	N
1498	HMDB0166459	NA	NA	NA	N
1499	HMDB0166458	NA	NA	NA	N
1500	HMDB0167799	NA	NA	NA	N
1501	HMDB0167916	NA	NA	NA	N
1502	HMDB0167915	NA	NA	NA	N
1503	HMDB0167919	NA	NA	NA	N
1504	HMDB0167920	NA	NA	NA	N
1505	HMDB0174514	NA	NA	NA	N
1506	HMDB0174512	NA	NA	NA	N
1507	HMDB0150620	NA	NA	NA	N
1508	HMDB0137604	NA	NA	NA	N
1509	HMDB0141191	NA	NA	NA	N
1510	HMDB0141189	NA	NA	NA	N
1511	HMDB0141190	NA	NA	NA	N
1512	HMDB0141338	NA	NA	NA	N
1513	HMDB0141339	NA	NA	NA	N
1514	HMDB0141340	NA	NA	NA	N
1515	HMDB0141957	NA	NA	NA	N
1516	HMDB0141958	NA	NA	NA	N
1517	HMDB0141977	NA	NA	NA	N
1518	HMDB0138627	NA	NA	NA	N
1519	HMDB0138628	NA	NA	NA	N
1520	HMDB0138108	NA	NA	NA	N
1521	HMDB0138106	NA	NA	NA	N
1522	HMDB0138107	NA	NA	NA	N
1523	HMDB0138611	NA	NA	NA	N
1524	HMDB0138610	NA	NA	NA	N
1525	HMDB0138612	NA	NA	NA	N
1526	HMDB0138615	NA	NA	NA	N
1527	HMDB0138614	NA	NA	NA	N
1528	HMDB0138616	NA	NA	NA	N
1529	HMDB0141978	NA	NA	NA	N
1530	HMDB0141979	NA	NA	NA	N
1531	HMDB0147811	NA	NA	NA	N
1532	HMDB0148397	NA	NA	NA	N
1533	HMDB0148396	NA	NA	NA	N
1534	HMDB0148861	NA	NA	NA	N
1535	HMDB0148862	NA	NA	NA	N
1536	HMDB0148863	NA	NA	NA	N
1537	HMDB0149622	NA	NA	NA	N
1538	HMDB0149623	NA	NA	NA	N
1539	HMDB0149621	NA	NA	NA	N
1540	HMDB0147810	NA	NA	NA	N
1541	HMDB0147809	NA	NA	NA	N
1542	HMDB0147215	NA	NA	NA	N
1543	HMDB0147216	NA	NA	NA	N
1544	HMDB0147217	NA	NA	NA	N
1545	HMDB0147667	NA	NA	NA	N
1546	HMDB0147668	NA	NA	NA	N
1547	HMDB0147669	NA	NA	NA	N
1548	HMDB0147807	NA	NA	NA	N
1549	HMDB0147806	NA	NA	NA	N
1550	HMDB0147808	NA	NA	NA	N
1551	HMDB0150619	NA	NA	NA	N
1552	HMDB0029209	naringenin-7-O-glucuronide	HMDB0029209	71772041	N
1553	HMDB0029208	NA	NA	NA	N
1554	HMDB0152304	NA	NA	NA	N
1555	HMDB0152365	NA	NA	NA	N
1556	HMDB0127356	NA	NA	NA	N
1557	HMDB0035588	Luteolin 7-glucoside	HMDB0035588	5280637	C
1558	HMDB0037377	NA	NA	NA	N
1559	HMDB0033751	Quercitrin	HMDB0033751	5280459	C
1560	HMDB0127455	NA	NA	NA	N
1561	HMDB0037359	NA	NA	NA	N
1562	HMDB0037572	NA	NA	NA	N
1563	HMDB0032903	1,2,6,8-Tetrahydroxy-3-methylanthraquinone 2-O-b-D-glucoside	HMDB0032903	131751347	N
1564	HMDB0038467	NA	NA	NA	N
1565	HMDB0037429	Kaempferol-3-O-glucoside	HMDB0037429	5282102	C
1566	HMDB0041760	NA	NA	NA	N
1567	HMDB0041761	NA	NA	NA	N
1568	HMDB0041759	NA	NA	NA	N
1569	HMDB0030864	Trifolin	HMDB0030864	583016	C
1570	HMDB0038468	NA	NA	NA	N
1571	HMDB0150658	NA	NA	NA	N
1572	HMDB0135149	NA	NA	NA	N
1573	HMDB0127468	NA	NA	NA	N
1574	HMDB0134900	NA	NA	NA	N
1575	HMDB0030614	Orientin	HMDB0030614	5382105	C

1576	HMDB0125126	NA	NA	NA	NA
1577	HMDB0125125	NA	NA	NA	NA
1578	HMDB0146010	NA	NA	NA	NA
1579	HMDB0146009	NA	NA	NA	NA
1580	HMDB0146011	NA	NA	NA	NA
1581	HMDB0147571	NA	NA	NA	NA
1582	HMDB0134562	NA	NA	NA	NA
1583	HMDB0134555	NA	NA	NA	NA
1584	HMDB0149625	NA	NA	NA	NA
1585	HMDB0134557	NA	NA	NA	NA
1586	HMDB0134553	NA	NA	NA	NA
1587	HMDB0134552	NA	NA	NA	NA
1588	HMDB0140802	NA	NA	NA	NA
1589	HMDB0134559	NA	NA	NA	NA
1590	HMDB0137583	NA	NA	NA	NA
1591	HMDB0137575	NA	NA	NA	NA
1592	HMDB0137567	NA	NA	NA	NA
1593	HMDB0137568	NA	NA	NA	NA
1594	HMDB0137535	NA	NA	NA	NA
1595	HMDB0137536	NA	NA	NA	NA
1596	HMDB0137584	NA	NA	NA	NA
1597	HMDB0134564	NA	NA	NA	NA
1598	HMDB0134563	NA	NA	NA	NA
1599	HMDB0134558	NA	NA	NA	NA
1600	HMDB0137591	NA	NA	NA	NA
1601	HMDB0134556	NA	NA	NA	NA
1602	HMDB0140801	NA	NA	NA	NA
1603	HMDB0134561	NA	NA	NA	NA
1604	HMDB0140803	NA	NA	NA	NA
1605	HMDB0137576	NA	NA	NA	NA
1606	HMDB0150623	NA	NA	NA	NA
1607	HMDB0152568	NA	NA	NA	NA
1608	HMDB0137592	NA	NA	NA	NA
1609	HMDB0041718	NA	NA	NA	NA
1610	HMDB0132467	NA	NA	NA	NA
1611	HMDB0147572	NA	NA	NA	NA
1612	HMDB0132466	NA	NA	NA	NA
1613	HMDB0134554	NA	NA	NA	NA
1614	HMDB0127308	NA	NA	NA	NA
1615	HMDB0129981	NA	NA	NA	NA
1616	HMDB0176692	NA	NA	NA	NA
1617	HMDB0176693	NA	NA	NA	NA
1618	HMDB0133343	NA	NA	NA	NA
1619	HMDB0133342	NA	NA	NA	NA
1620	HMDB0033587	Coumestrin	HMDB0033587	74977392	NA
1621	HMDB0130935	NA	NA	NA	NA
1622	HMDB0130934	NA	NA	NA	NA
1623	HMDB0130920	NA	NA	NA	NA
1624	HMDB0130919	NA	NA	NA	NA
1625	HMDB0041717	NA	NA	NA	NA
1626	HMDB0034757	4-Methoxybenzenepropanol 1-(2-sulfoglucoside)	HMDB0034757	74087011	NA
1627	HMDB0037978	NA	NA	NA	NA
1628	HMDB0037977	NA	NA	NA	NA
1629	HMDB0030684	Cyanidin 3-glucoside	HMDB0030684	4481259	NA
1630	HMDB0037990	NA	NA	NA	NA
1631	HMDB0177487	NA	NA	NA	NA
1632	HMDB0130052	NA	NA	NA	NA
1633	HMDB0130056	NA	NA	NA	NA
1634	HMDB0130055	NA	NA	NA	NA
1635	HMDB0130054	NA	NA	NA	NA
1636	HMDB0130053	NA	NA	NA	NA
1637	HMDB0130050	NA	NA	NA	NA
1638	HMDB0177486	NA	NA	NA	NA
1639	HMDB0128977	NA	NA	NA	NA
1640	HMDB0177485	NA	NA	NA	NA
1641	HMDB0135804	NA	NA	NA	NA
1642	HMDB0130092	NA	NA	NA	NA
1643	HMDB0135802	NA	NA	NA	NA
1644	HMDB0130091	NA	NA	NA	NA
1645	HMDB0130057	NA	NA	NA	NA
1646	HMDB0135803	NA	NA	NA	NA
1647	HMDB0135799	NA	NA	NA	NA
1648	HMDB0061321	NA	NA	NA	NA
1649	HMDB0041340	NA	NA	NA	NA
1650	HMDB0139434	NA	NA	NA	NA
1651	HMDB0139431	NA	NA	NA	NA
1652	HMDB0139135	NA	NA	NA	NA
1653	HMDB0139127	NA	NA	NA	NA
1654	HMDB0139128	NA	NA	NA	NA
1655	HMDB0038222	NA	NA	NA	NA
1656	HMDB0143654	NA	NA	NA	NA
1657	HMDB0168835	NA	NA	NA	NA
1658	HMDB0172039	NA	NA	NA	NA
1659	HMDB0172038	NA	NA	NA	NA
1660	HMDB0147906	NA	NA	NA	NA
1661	HMDB0147908	NA	NA	NA	NA
1662	HMDB0147913	NA	NA	NA	NA

1663	HMDB0147911	NA	NA	NA	N
1664	HMDB0137740	NA	NA	NA	N
1665	HMDB0137741	NA	NA	NA	N
1666	HMDB0153291	NA	NA	NA	N
1667	HMDB0127859	NA	NA	NA	N
1668	HMDB0127863	NA	NA	NA	N
1669	HMDB0127864	NA	NA	NA	N
1670	HMDB0130149	NA	NA	NA	N
1671	HMDB0130706	NA	NA	NA	N
1672	HMDB0060316	NA	NA	NA	N
1673	HMDB0187596	NA	NA	NA	N
1674	HMDB0177133	NA	NA	NA	N
1675	HMDB0173745	NA	NA	NA	N
1676	HMDB0149453	NA	NA	NA	N
1677	HMDB0173748	NA	NA	NA	N
1678	HMDB0173758	NA	NA	NA	N
1679	HMDB0177136	NA	NA	NA	N
1680	HMDB0143918	NA	NA	NA	N
1681	HMDB0143947	NA	NA	NA	N
1682	HMDB0166050	NA	NA	NA	N
1683	HMDB0166048	NA	NA	NA	N
1684	HMDB0166047	NA	NA	NA	N
1685	HMDB0166046	NA	NA	NA	N
1686	HMDB0144019	NA	NA	NA	N
1687	HMDB0143957	NA	NA	NA	N
1688	HMDB0149962	NA	NA	NA	N
1689	HMDB0061300	NA	NA	NA	N
1690	HMDB0181870	NA	NA	NA	N
1691	HMDB0181866	NA	NA	NA	N
1692	HMDB0181848	NA	NA	NA	N
1693	HMDB0181872	NA	NA	NA	N
1694	HMDB0181865	NA	NA	NA	N
1695	HMDB0181867	NA	NA	NA	N
1696	HMDB0181860	NA	NA	NA	N
1697	HMDB0181861	NA	NA	NA	N
1698	HMDB0182987	NA	NA	NA	N
1699	HMDB0165062	NA	NA	NA	N
1700	HMDB0178480	NA	NA	NA	N
1701	HMDB0178481	NA	NA	NA	N
1702	HMDB0181842	NA	NA	NA	N
1703	HMDB0181843	NA	NA	NA	N
1704	HMDB0181844	NA	NA	NA	N
1705	HMDB0181850	NA	NA	NA	N
1706	HMDB0181849	NA	NA	NA	N
1707	HMDB0181854	NA	NA	NA	N
1708	HMDB0181856	NA	NA	NA	N
1709	HMDB0181855	NA	NA	NA	N
1710	HMDB0181859	NA	NA	NA	N
1711	HMDB0182973	NA	NA	NA	N
1712	HMDB0181876	NA	NA	NA	N
1713	HMDB0182977	NA	NA	NA	N
1714	HMDB0182976	NA	NA	NA	N
1715	HMDB0182978	NA	NA	NA	N
1716	HMDB0182981	NA	NA	NA	N
1717	HMDB0182982	NA	NA	NA	N
1718	HMDB0182986	NA	NA	NA	N
1719	HMDB0182985	NA	NA	NA	N
1720	HMDB0034120	Lusitanicoside	HMDB0034120	4484591	C
1721	HMDB0182990	NA	NA	NA	N
1722	HMDB0182989	NA	NA	NA	N
1723	HMDB0182991	NA	NA	NA	N
1724	HMDB0182972	NA	NA	NA	N
1725	HMDB0182968	NA	NA	NA	N
1726	HMDB0182971	NA	NA	NA	N
1727	HMDB0181878	NA	NA	NA	N
1728	HMDB0181877	NA	NA	NA	N
1729	HMDB0182895	NA	NA	NA	N
1730	HMDB0182896	NA	NA	NA	N
1731	HMDB0182961	NA	NA	NA	N
1732	HMDB0182962	NA	NA	NA	N
1733	HMDB0182963	NA	NA	NA	N
1734	HMDB0182966	NA	NA	NA	N
1735	HMDB0181871	NA	NA	NA	N
1736	HMDB0182967	NA	NA	NA	N
1737	HMDB0061351	NA	NA	NA	N
1738	HMDB0015354	Aminophylline	HMDB0015354	9433	
1739	HMDB0010366	Hyaluronan	HMDB0010366	24759	
1740	HMDB0060932	NA	NA	NA	N
1741	HMDB0145086	NA	NA	NA	N
1742	HMDB0145075	NA	NA	NA	N
1743	HMDB0030556	Tovophyllin B	HMDB0030556	509268	
1744	HMDB0036983	NA	NA	NA	N
1745	HMDB0161553	NA	NA	NA	N
1746	HMDB0161551	NA	NA	NA	N
1747	HMDB0161568	NA	NA	NA	N
1748	HMDB0161555	NA	NA	NA	N
1749	HMDB0161562	NA	NA	NA	N

1750	HMDB0161601	NA	NA	NA	N
1751	HMDB0161594	NA	NA	NA	N
1752	HMDB0161592	NA	NA	NA	N
1753	HMDB0015315	Domperidone	HMDB0015315	3151	
1754	HMDB0040608	NA	NA	NA	N
1755	HMDB0125154	NA	NA	NA	N
1756	HMDB0125155	NA	NA	NA	N
1757	HMDB0125152	NA	NA	NA	N
1758	HMDB0140799	NA	NA	NA	N
1759	HMDB0140813	NA	NA	NA	N
1760	HMDB0140814	NA	NA	NA	N
1761	HMDB0140815	NA	NA	NA	N
1762	HMDB0140816	NA	NA	NA	N
1763	HMDB0145979	NA	NA	NA	N
1764	HMDB0145981	NA	NA	NA	N
1765	HMDB0145982	NA	NA	NA	N
1766	HMDB0145980	NA	NA	NA	N
1767	HMDB0146014	NA	NA	NA	N
1768	HMDB0146013	NA	NA	NA	N
1769	HMDB0146016	NA	NA	NA	N
1770	HMDB0146015	NA	NA	NA	N
1771	HMDB0146018	NA	NA	NA	N
1772	HMDB0146019	NA	NA	NA	N
1773	HMDB0125153	NA	NA	NA	N
1774	HMDB0140798	NA	NA	NA	N
1775	HMDB0146020	NA	NA	NA	N
1776	HMDB0140796	NA	NA	NA	N
1777	HMDB0140797	NA	NA	NA	N
1778	HMDB0137560	NA	NA	NA	N
1779	HMDB0137541	NA	NA	NA	N
1780	HMDB0137543	NA	NA	NA	N
1781	HMDB0137542	NA	NA	NA	N
1782	HMDB0137545	NA	NA	NA	N
1783	HMDB0137546	NA	NA	NA	N
1784	HMDB0137547	NA	NA	NA	N
1785	HMDB0137549	NA	NA	NA	N
1786	HMDB0148858	NA	NA	NA	N
1787	HMDB0137551	NA	NA	NA	N
1788	HMDB0137553	NA	NA	NA	N
1789	HMDB0137555	NA	NA	NA	N
1790	HMDB0137554	NA	NA	NA	N
1791	HMDB0137558	NA	NA	NA	N
1792	HMDB0137559	NA	NA	NA	N
1793	HMDB0137550	NA	NA	NA	N
1794	HMDB0147724	NA	NA	NA	N
1795	HMDB0152552	NA	NA	NA	N
1796	HMDB0152629	NA	NA	NA	N
1797	HMDB0152687	NA	NA	NA	N
1798	HMDB0166440	NA	NA	NA	N
1799	HMDB0166439	NA	NA	NA	N
1800	HMDB0166438	NA	NA	NA	N
1801	HMDB0167884	NA	NA	NA	N
1802	HMDB0167885	NA	NA	NA	N
1803	HMDB0174494	NA	NA	NA	N
1804	HMDB0174493	NA	NA	NA	N
1805	HMDB0174495	NA	NA	NA	N
1806	HMDB0176694	NA	NA	NA	N
1807	HMDB0176696	NA	NA	NA	N
1808	HMDB0176698	NA	NA	NA	N
1809	HMDB0176695	NA	NA	NA	N
1810	HMDB0176697	NA	NA	NA	N
1811	HMDB0152551	NA	NA	NA	N
1812	HMDB0151996	NA	NA	NA	N
1813	HMDB0151995	NA	NA	NA	N
1814	HMDB0147722	NA	NA	NA	N
1815	HMDB0147737	NA	NA	NA	N
1816	HMDB0147735	NA	NA	NA	N
1817	HMDB0147736	NA	NA	NA	N
1818	HMDB0147739	NA	NA	NA	N
1819	HMDB0147738	NA	NA	NA	N
1820	HMDB0147740	NA	NA	NA	N
1821	HMDB0148857	NA	NA	NA	N
1822	HMDB0148859	NA	NA	NA	N
1823	HMDB0149608	NA	NA	NA	N
1824	HMDB0149609	NA	NA	NA	N
1825	HMDB0150617	NA	NA	NA	N
1826	HMDB0150616	NA	NA	NA	N
1827	HMDB0150650	NA	NA	NA	N
1828	HMDB0150652	NA	NA	NA	N
1829	HMDB0151994	NA	NA	NA	N
1830	HMDB0176699	NA	NA	NA	N
1831	HMDB0134895	NA	NA	NA	N
1832	HMDB0041738	NA	NA	NA	N
1833	HMDB0041737	NA	NA	NA	N
1834	HMDB0132462	NA	NA	NA	N
1835	HMDB0240480	NA	NA	NA	N
1836	HMDB0032877	Glucorhein	HMDB0032877	14345558	

1837	HMDB0150651	NA	NA	NA	N
1838	HMDB0147723	NA	NA	NA	N
1839	HMDB0129971	NA	NA	NA	N
1840	HMDB0134897	NA	NA	NA	N
1841	HMDB0133326	NA	NA	NA	N
1842	HMDB0134896	NA	NA	NA	N
1843	HMDB0041739	NA	NA	NA	N
1844	HMDB0130203	NA	NA	NA	N
1845	HMDB0132464	NA	NA	NA	N
1846	HMDB0125399	NA	NA	NA	N
1847	HMDB0125397	NA	NA	NA	N
1848	HMDB0041832	NA	NA	NA	N
1849	HMDB0130783	NA	NA	NA	N
1850	HMDB0130782	NA	NA	NA	N
1851	HMDB0132463	NA	NA	NA	N
1852	HMDB0133327	NA	NA	NA	N
1853	HMDB0133328	NA	NA	NA	N
1854	HMDB0133352	NA	NA	NA	N
1855	HMDB0133353	NA	NA	NA	N
1856	HMDB0133351	NA	NA	NA	N
1857	HMDB0133375	NA	NA	NA	N
1858	HMDB0133376	NA	NA	NA	N
1859	HMDB0133377	NA	NA	NA	N
1860	HMDB0130202	NA	NA	NA	N
1861	HMDB0125398	NA	NA	NA	N
1862	HMDB0129970	NA	NA	NA	N
1863	HMDB0130004	NA	NA	NA	N
1864	HMDB0138604	NA	NA	NA	N
1865	HMDB0138607	NA	NA	NA	N
1866	HMDB0138605	NA	NA	NA	N
1867	HMDB0141185	NA	NA	NA	N
1868	HMDB0141186	NA	NA	NA	N
1869	HMDB0138601	NA	NA	NA	N
1870	HMDB0138602	NA	NA	NA	N
1871	HMDB0138609	NA	NA	NA	N
1872	HMDB0141184	NA	NA	NA	N
1873	HMDB0140570	NA	NA	NA	N
1874	HMDB0140571	NA	NA	NA	N
1875	HMDB0140569	NA	NA	NA	N
1876	HMDB0138606	NA	NA	NA	N
1877	HMDB0138608	NA	NA	NA	N
1878	HMDB0140572	NA	NA	NA	N
1879	HMDB0141187	NA	NA	NA	N
1880	HMDB0147489	NA	NA	NA	N
1881	HMDB0147487	NA	NA	NA	N
1882	HMDB0147490	NA	NA	NA	N
1883	HMDB0147488	NA	NA	NA	N
1884	HMDB0147491	NA	NA	NA	N
1885	HMDB0147492	NA	NA	NA	N
1886	HMDB0147670	NA	NA	NA	N
1887	HMDB0147672	NA	NA	NA	N
1888	HMDB0147673	NA	NA	NA	N
1889	HMDB0147671	NA	NA	NA	N
1890	HMDB0147486	NA	NA	NA	N
1891	HMDB0147485	NA	NA	NA	N
1892	HMDB0147484	NA	NA	NA	N
1893	HMDB0141954	NA	NA	NA	N
1894	HMDB0141955	NA	NA	NA	N
1895	HMDB0148865	NA	NA	NA	N
1896	HMDB0146722	NA	NA	NA	N
1897	HMDB0146721	NA	NA	NA	N
1898	HMDB0146723	NA	NA	NA	N
1899	HMDB0146724	NA	NA	NA	N
1900	HMDB0147482	NA	NA	NA	N
1901	HMDB0147481	NA	NA	NA	N
1902	HMDB0147483	NA	NA	NA	N
1903	HMDB0147674	NA	NA	NA	N
1904	HMDB0138600	NA	NA	NA	N
1905	HMDB0138597	NA	NA	NA	N
1906	HMDB0131994	NA	NA	NA	N
1907	HMDB0131997	NA	NA	NA	N
1908	HMDB0131998	NA	NA	NA	N
1909	HMDB0133370	NA	NA	NA	N
1910	HMDB0133372	NA	NA	NA	N
1911	HMDB0133373	NA	NA	NA	N
1912	HMDB0133380	NA	NA	NA	N
1913	HMDB0133379	NA	NA	NA	N
1914	HMDB0131996	NA	NA	NA	N
1915	HMDB0131995	NA	NA	NA	N
1916	HMDB0130212	NA	NA	NA	N
1917	HMDB0130242	NA	NA	NA	N
1918	HMDB0130243	NA	NA	NA	N
1919	HMDB0130244	NA	NA	NA	N
1920	HMDB0131989	NA	NA	NA	N
1921	HMDB0131991	NA	NA	NA	N
1922	HMDB0131992	NA	NA	NA	N
1923	HMDB0131990	NA	NA	NA	N

1924	HMDB0133381	NA	NA	NA	N
1925	HMDB0133382	NA	NA	NA	N
1926	HMDB0133587	NA	NA	NA	N
1927	HMDB0133851	NA	NA	NA	N
1928	HMDB0133849	NA	NA	NA	N
1929	HMDB0133850	NA	NA	NA	N
1930	HMDB0133852	NA	NA	NA	N
1931	HMDB0138595	NA	NA	NA	N
1932	HMDB0138596	NA	NA	NA	N
1933	HMDB0138598	NA	NA	NA	N
1934	HMDB0133588	NA	NA	NA	N
1935	HMDB0133586	NA	NA	NA	N
1936	HMDB0133554	NA	NA	NA	N
1937	HMDB0133553	NA	NA	NA	N
1938	HMDB0133555	NA	NA	NA	N
1939	HMDB0133582	NA	NA	NA	N
1940	HMDB0133581	NA	NA	NA	N
1941	HMDB0133580	NA	NA	NA	N
1942	HMDB0133583	NA	NA	NA	N
1943	HMDB0133584	NA	NA	NA	N
1944	HMDB0130211	NA	NA	NA	N
1945	HMDB0151823	NA	NA	NA	N
1946	HMDB0176675	NA	NA	NA	N
1947	HMDB0154291	NA	NA	NA	N
1948	HMDB0154292	NA	NA	NA	N
1949	HMDB0153010	NA	NA	NA	N
1950	HMDB0152079	NA	NA	NA	N
1951	HMDB0153006	NA	NA	NA	N
1952	HMDB0153007	NA	NA	NA	N
1953	HMDB0153009	NA	NA	NA	N
1954	HMDB0176678	NA	NA	NA	N
1955	HMDB0176677	NA	NA	NA	N
1956	HMDB0177380	NA	NA	NA	N
1957	HMDB0177379	NA	NA	NA	N
1958	HMDB0177375	NA	NA	NA	N
1959	HMDB0177373	NA	NA	NA	N
1960	HMDB0177374	NA	NA	NA	N
1961	HMDB0176676	NA	NA	NA	N
1962	HMDB0176679	NA	NA	NA	N
1963	HMDB0153008	NA	NA	NA	N
1964	HMDB0153005	NA	NA	NA	N
1965	HMDB0152136	NA	NA	NA	N
1966	HMDB0152081	NA	NA	NA	N
1967	HMDB0152080	NA	NA	NA	N
1968	HMDB0151820	NA	NA	NA	N
1969	HMDB0151821	NA	NA	NA	N
1970	HMDB0151825	NA	NA	NA	N
1971	HMDB0151826	NA	NA	NA	N
1972	HMDB0151824	NA	NA	NA	N
1973	HMDB0152135	NA	NA	NA	N
1974	HMDB0152623	NA	NA	NA	N
1975	HMDB0152684	NA	NA	NA	N
1976	HMDB0152685	NA	NA	NA	N
1977	HMDB0151819	NA	NA	NA	N
1978	HMDB0152682	NA	NA	NA	N
1979	HMDB0152683	NA	NA	NA	N
1980	HMDB0152625	NA	NA	NA	N
1981	HMDB0152626	NA	NA	NA	N
1982	HMDB0152624	NA	NA	NA	N
1983	HMDB0151822	NA	NA	NA	N
1984	HMDB0151188	NA	NA	NA	N
1985	HMDB0148398	NA	NA	NA	N
1986	HMDB0148402	NA	NA	NA	N
1987	HMDB0148399	NA	NA	NA	N
1988	HMDB0148401	NA	NA	NA	N
1989	HMDB0148400	NA	NA	NA	N
1990	HMDB0148405	NA	NA	NA	N
1991	HMDB0148404	NA	NA	NA	N
1992	HMDB0148403	NA	NA	NA	N
1993	HMDB0147683	NA	NA	NA	N
1994	HMDB0147684	NA	NA	NA	N
1995	HMDB0147675	NA	NA	NA	N
1996	HMDB0147677	NA	NA	NA	N
1997	HMDB0147676	NA	NA	NA	N
1998	HMDB0147681	NA	NA	NA	N
1999	HMDB0147682	NA	NA	NA	N
2000	HMDB0147679	NA	NA	NA	N
2001	HMDB0147680	NA	NA	NA	N
2002	HMDB0147685	NA	NA	NA	N
2003	HMDB0148406	NA	NA	NA	N
2004	HMDB0148408	NA	NA	NA	N
2005	HMDB0148833	NA	NA	NA	N
2006	HMDB0148832	NA	NA	NA	N
2007	HMDB0148866	NA	NA	NA	N
2008	HMDB0148870	NA	NA	NA	N
2009	HMDB0148868	NA	NA	NA	N
2010	HMDB0148867	NA	NA	NA	N



2011	HMDB0148871	NA	NA	NA	NA
2012	HMDB0148872	NA	NA	NA	NA
2013	HMDB0148834	NA	NA	NA	NA
2014	HMDB0148831	NA	NA	NA	NA
2015	HMDB0148409	NA	NA	NA	NA
2016	HMDB0148407	NA	NA	NA	NA
2017	HMDB0148410	NA	NA	NA	NA
2018	HMDB0148413	NA	NA	NA	NA
2019	HMDB0148412	NA	NA	NA	NA
2020	HMDB0148414	NA	NA	NA	NA
2021	HMDB0148411	NA	NA	NA	NA
2022	HMDB0148415	NA	NA	NA	NA
2023	HMDB0147678	NA	NA	NA	NA
2024	HMDB0133371	NA	NA	NA	NA
2025	HMDB0154282	NA	NA	NA	NA
2026	HMDB0135151	NA	NA	NA	NA
2027	HMDB0126559	NA	NA	NA	NA
2028	HMDB0035883	2'-Hydroxyisoorientin	HMDB0035883	74977759	NA
2029	HMDB0037932	NA	NA	NA	NA
2030	HMDB0034360	Myricitrin	HMDB0034360	5352000	NA
2031	HMDB0037362	Quercetin 3-glucoside	HMDB0037362	5280804	NA
2032	HMDB0030775	Quercetin 3-galactoside	HMDB0030775	5281643	NA
2033	HMDB0033132	Myricetin 7-rhamnoside	HMDB0033132	76594575	NA
2034	HMDB0040478	NA	NA	NA	NA
2035	HMDB0152389	NA	NA	NA	NA
2036	HMDB0034725	6-Hydroxykaempferol 7-glucoside	HMDB0034725	14825511	NA
2037	HMDB0130209	NA	NA	NA	NA
2038	HMDB0125432	NA	NA	NA	NA
2039	HMDB0125428	NA	NA	NA	NA
2040	HMDB0125430	NA	NA	NA	NA
2041	HMDB0125429	NA	NA	NA	NA
2042	HMDB0125400	NA	NA	NA	NA
2043	HMDB0125401	NA	NA	NA	NA
2044	HMDB0125402	NA	NA	NA	NA
2045	HMDB0125394	NA	NA	NA	NA
2046	HMDB0125393	NA	NA	NA	NA
2047	HMDB0125392	NA	NA	NA	NA
2048	HMDB0125285	NA	NA	NA	NA
2049	HMDB0125284	NA	NA	NA	NA
2050	HMDB0125286	NA	NA	NA	NA
2051	HMDB0125434	NA	NA	NA	NA
2052	HMDB0125435	NA	NA	NA	NA
2053	HMDB0130208	NA	NA	NA	NA
2054	HMDB0130199	NA	NA	NA	NA
2055	HMDB0130200	NA	NA	NA	NA
2056	HMDB0130198	NA	NA	NA	NA
2057	HMDB0130002	NA	NA	NA	NA
2058	HMDB0129999	NA	NA	NA	NA
2059	HMDB0130001	NA	NA	NA	NA
2060	HMDB0130000	NA	NA	NA	NA
2061	HMDB0129298	NA	NA	NA	NA
2062	HMDB0129297	NA	NA	NA	NA
2063	HMDB0125453	NA	NA	NA	NA
2064	HMDB0125452	NA	NA	NA	NA
2065	HMDB0125451	NA	NA	NA	NA
2066	HMDB0125433	NA	NA	NA	NA
2067	HMDB0130210	NA	NA	NA	NA
2068	HMDB0130554	NA	NA	NA	NA
2069	HMDB0033145	Azimsulfuron	HMDB0033145	86355	NA
2070	HMDB0130553	NA	NA	NA	NA
2071	HMDB0037997	Delphinidin 3-O-beta-D-glucoside	HMDB0037997	443650	NA
2072	HMDB0032645	3-Glucosyl-2,3',4,4',6-pentahydroxybenzophenone	HMDB0032645	75169766	NA
2073	HMDB0168336	NA	NA	NA	NA
2074	HMDB0168337	NA	NA	NA	NA
2075	HMDB0011118	Se-Adenosylselenomethionine	HMDB0011118	24892761	NA
2076	HMDB0177362	NA	NA	NA	NA
2077	HMDB0153478	NA	NA	NA	NA
2078	HMDB0153479	NA	NA	NA	NA
2079	HMDB0144083	NA	NA	NA	NA
2080	HMDB0014756	Demeclocycline	HMDB0014756	NA	NA
2081	HMDB0144082	NA	NA	NA	NA
2082	HMDB0144089	NA	NA	NA	NA
2083	HMDB0144143	NA	NA	NA	NA
2084	HMDB0155879	NA	NA	NA	NA
2085	HMDB0155877	NA	NA	NA	NA
2086	HMDB0155880	NA	NA	NA	NA
2087	HMDB0155878	NA	NA	NA	NA
2088	HMDB0139452	NA	NA	NA	NA
2089	HMDB0139460	NA	NA	NA	NA
2090	HMDB0139443	NA	NA	NA	NA
2091	HMDB0139440	NA	NA	NA	NA
2092	HMDB0139446	NA	NA	NA	NA
2093	HMDB0139445	NA	NA	NA	NA
2094	HMDB0139448	NA	NA	NA	NA
2095	HMDB0139137	NA	NA	NA	NA
2096	HMDB0139156	NA	NA	NA	NA
2097	HMDB0139154	NA	NA	NA	NA

2098	HMDB0139143	NA	NA	NA	N
2099	HMDB0139145	NA	NA	NA	N
2100	HMDB0139144	NA	NA	NA	N
2101	HMDB0139136	NA	NA	NA	N
2102	HMDB0139146	NA	NA	NA	N
2103	HMDB0139139	NA	NA	NA	N
2104	HMDB0139138	NA	NA	NA	N
2105	HMDB0139142	NA	NA	NA	N
2106	HMDB0033342	Mollicellin E	HMDB0033342	50201	N
2107	HMDB0061320	NA	NA	NA	N
2108	HMDB0014542	Sorafenib	HMDB0014542	216239	C
2109	HMDB0015260	Bicalutamide	HMDB0015260	2375	N
2110	HMDB0144668	NA	NA	NA	N
2111	HMDB0060067	CMPciliatine	HMDB0060067	440754	C
2112	HMDB0187650	NA	NA	NA	N
2113	HMDB0187649	NA	NA	NA	N
2114	HMDB0127942	NA	NA	NA	N
2115	HMDB0127943	NA	NA	NA	N
2116	HMDB0127944	NA	NA	NA	N
2117	HMDB0183599	NA	NA	NA	N
2118	HMDB0183598	NA	NA	NA	N
2119	HMDB0130756	NA	NA	NA	N
2120	HMDB0183476	NA	NA	NA	N
2121	HMDB0183475	NA	NA	NA	N
2122	HMDB0149511	NA	NA	NA	N
2123	HMDB0149481	NA	NA	NA	N
2124	HMDB0149488	NA	NA	NA	N
2125	HMDB0149485	NA	NA	NA	N
2126	HMDB0149496	NA	NA	NA	N
2127	HMDB0149489	NA	NA	NA	N
2128	HMDB0149495	NA	NA	NA	N
2129	HMDB0149499	NA	NA	NA	N
2130	HMDB0149508	NA	NA	NA	N
2131	HMDB0149492	NA	NA	NA	N
2132	HMDB0126048	NA	NA	NA	N
2133	HMDB0126050	NA	NA	NA	N
2134	HMDB0152254	NA	NA	NA	N
2135	HMDB0152255	NA	NA	NA	N
2136	HMDB0152269	NA	NA	NA	N
2137	HMDB0152268	NA	NA	NA	N
2138	HMDB0152267	NA	NA	NA	N
2139	HMDB0152243	NA	NA	NA	N
2140	HMDB0014702	Benzthiazide	HMDB0014702	2343	C
2141	HMDB0149310	NA	NA	NA	N
2142	HMDB0149365	NA	NA	NA	N
2143	HMDB0149309	NA	NA	NA	N
2144	HMDB0180711	NA	NA	NA	N
2145	HMDB0180709	NA	NA	NA	N
2146	HMDB0181386	NA	NA	NA	N
2147	HMDB0181352	NA	NA	NA	N
2148	HMDB0169481	NA	NA	NA	N
2149	HMDB0169484	NA	NA	NA	N
2150	HMDB0169488	NA	NA	NA	N
2151	HMDB0169493	NA	NA	NA	N
2152	HMDB0169494	NA	NA	NA	N
2153	HMDB0169489	NA	NA	NA	N
2154	HMDB0169483	NA	NA	NA	N
2155	HMDB0153769	NA	NA	NA	N
2156	HMDB0132576	NA	NA	NA	N
2157	HMDB0153748	NA	NA	NA	N
2158	HMDB0153752	NA	NA	NA	N
2159	HMDB0150545	NA	NA	NA	N
2160	HMDB0182425	NA	NA	NA	N
2161	HMDB0132595	NA	NA	NA	N
2162	HMDB0148624	NA	NA	NA	N
2163	HMDB0150591	NA	NA	NA	N
2164	HMDB0150556	NA	NA	NA	N
2165	HMDB0148638	NA	NA	NA	N
2166	HMDB0149542	NA	NA	NA	N
2167	HMDB0038789	NA	NA	NA	N
2168	HMDB0132570	NA	NA	NA	N
2169	HMDB0125974	NA	NA	NA	N
2170	HMDB0149541	NA	NA	NA	N
2171	HMDB0132590	NA	NA	NA	N
2172	HMDB0037073	NA	NA	NA	N
2173	HMDB0037076	NA	NA	NA	N
2174	HMDB0037077	NA	NA	NA	N
2175	HMDB0037074	NA	NA	NA	N
2176	HMDB0037078	NA	NA	NA	N
2177	HMDB0037075	NA	NA	NA	N
2178	HMDB0149684	NA	NA	NA	N
2179	HMDB0132300	NA	NA	NA	N
2180	HMDB0240554	NA	NA	NA	N
2181	HMDB0240553	NA	NA	NA	N
2182	HMDB0153938	NA	NA	NA	N
2183	HMDB0153931	NA	NA	NA	N
2184	HMDB0132301	NA	NA	NA	N

2185	HMDB0128509	NA	NA	NA	N
2186	HMDB0149686	NA	NA	NA	N
2187	HMDB0149685	NA	NA	NA	N
2188	HMDB0149687	NA	NA	NA	N
2189	HMDB0149688	NA	NA	NA	N
2190	HMDB0153870	NA	NA	NA	N
2191	HMDB0153876	NA	NA	NA	N
2192	HMDB0153910	NA	NA	NA	N
2193	HMDB0153916	NA	NA	NA	N
2194	HMDB0014499	Aztreonam	HMDB0014499	5742832	C
2195	HMDB0162567	NA	NA	NA	N
2196	HMDB0176369	NA	NA	NA	N
2197	HMDB0176368	NA	NA	NA	N
2198	HMDB0176362	NA	NA	NA	N
2199	HMDB0176365	NA	NA	NA	N
2200	HMDB0176364	NA	NA	NA	N
2201	HMDB0176367	NA	NA	NA	N
2202	HMDB0176361	NA	NA	NA	N
2203	HMDB0176360	NA	NA	NA	N
2204	HMDB0176357	NA	NA	NA	N
2205	HMDB0176358	NA	NA	NA	N
2206	HMDB0176356	NA	NA	NA	N
2207	HMDB0180016	NA	NA	NA	N
2208	HMDB0180015	NA	NA	NA	N
2209	HMDB0005039	Sildenafil	HMDB0005039	5212	C
2210	HMDB0015327	Estramustine	HMDB0015327	259331	C
2211	HMDB0061126	NA	NA	NA	N
2212	HMDB0014843	Delavirdine	HMDB0014843	5625	C
2213	HMDB0168622	NA	NA	NA	N
2214	HMDB0168616	NA	NA	NA	N
2215	HMDB0161727	NA	NA	NA	N
2216	HMDB0161729	NA	NA	NA	N
2217	HMDB0161731	NA	NA	NA	N
2218	HMDB0161738	NA	NA	NA	N
2219	HMDB0161744	NA	NA	NA	N
2220	HMDB0168612	NA	NA	NA	N
2221	HMDB0168614	NA	NA	NA	N
2222	HMDB0168633	NA	NA	NA	N
2223	HMDB0168625	NA	NA	NA	N
2224	HMDB0168618	NA	NA	NA	N
2225	HMDB0168620	NA	NA	NA	N
2226	HMDB0014326	Flunisolide	HMDB0014326	82153	C
2227	HMDB0140059	NA	NA	NA	N
2228	HMDB0139825	NA	NA	NA	N
2229	HMDB0139836	NA	NA	NA	N
2230	HMDB0139837	NA	NA	NA	N
2231	HMDB0139835	NA	NA	NA	N
2232	HMDB0139834	NA	NA	NA	N
2233	HMDB0139833	NA	NA	NA	N
2234	HMDB0139830	NA	NA	NA	N
2235	HMDB0139831	NA	NA	NA	N
2236	HMDB0139829	NA	NA	NA	N
2237	HMDB0139832	NA	NA	NA	N
2238	HMDB0139826	NA	NA	NA	N
2239	HMDB0139823	NA	NA	NA	N
2240	HMDB0139838	NA	NA	NA	N
2241	HMDB0139824	NA	NA	NA	N
2242	HMDB0034578	Deterrol stearate	HMDB0034578	57473060	C
2243	HMDB0030272	Carpaine	HMDB0030272	103019	C
2244	HMDB0149983	NA	NA	NA	N
2245	HMDB0032284	NA	NA	NA	N
2246	HMDB0038386	NA	NA	NA	N
2247	HMDB0168919	NA	NA	NA	N
2248	HMDB0168926	NA	NA	NA	N
2249	HMDB0168917	NA	NA	NA	N
2250	HMDB0168925	NA	NA	NA	N
2251	HMDB0168922	NA	NA	NA	N
2252	HMDB0168920	NA	NA	NA	N
2253	HMDB0168923	NA	NA	NA	N
2254	HMDB0168928	NA	NA	NA	N
2255	HMDB0168929	NA	NA	NA	N
2256	HMDB0168931	NA	NA	NA	N
2257	HMDB0168934	NA	NA	NA	N
2258	HMDB0168932	NA	NA	NA	N
2259	HMDB0168935	NA	NA	NA	N
2260	HMDB0168936	NA	NA	NA	N
2261	HMDB0168913	NA	NA	NA	N
2262	HMDB0168911	NA	NA	NA	N
2263	HMDB0168916	NA	NA	NA	N
2264	HMDB0168864	NA	NA	NA	N
2265	HMDB0168910	NA	NA	NA	N
2266	HMDB0168907	NA	NA	NA	N
2267	HMDB0168909	NA	NA	NA	N
2268	HMDB0168908	NA	NA	NA	N
2269	HMDB0168912	NA	NA	NA	N
2270	HMDB0168914	NA	NA	NA	N

2271	HMDB0039580	NA	NA	NA	N
------	-------------	----	----	----	---

## 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

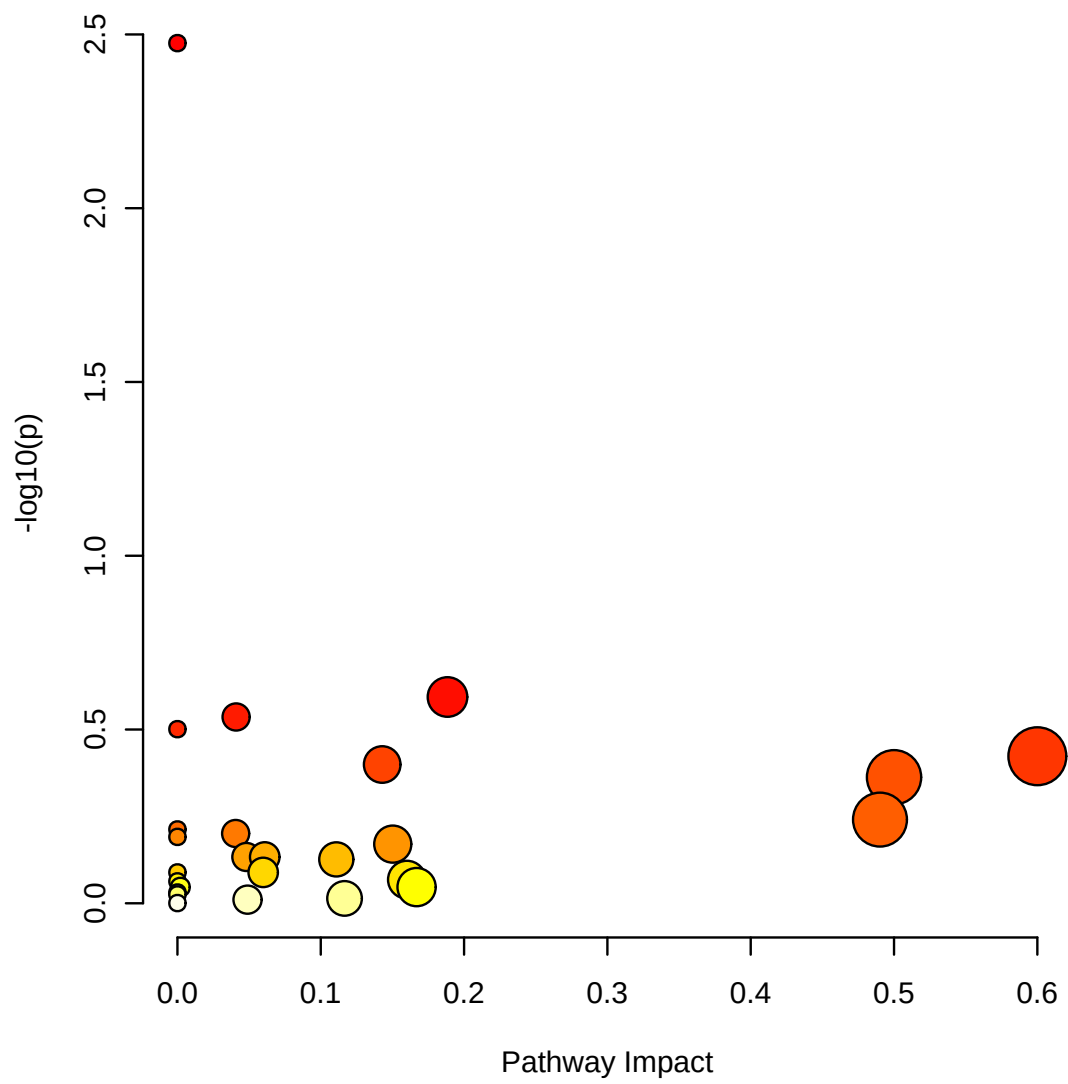


Figure 1: Summary of Pathway Analysis

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
Valine, leucine and isoleucine biosynthesis	8	0.72	4	3.35E-03	2.48E+00	2.81E-01	2.81E-01	0.00
Arginine and proline metabolism	38	3.43	5	2.55E-01	5.94E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.19
Valine, leucine and isoleucine degradation	40	3.61	5	2.91E-01	5.36E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.04
D-Arginine and D-ornithine metabolism	4	0.36	1	3.15E-01	5.01E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Synthesis and degradation of ketone bodies	5	0.45	1	3.77E-01	4.23E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.60
Butanoate metabolism	15	1.35	2	3.99E-01	3.99E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.14
Phosphonate and phosphinate metabolism	6	0.54	1	4.34E-01	3.63E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.50
Vitamin B6 metabolism	9	0.81	1	5.74E-01	2.41E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.49
Phenylalanine metabolism	10	0.90	1	6.13E-01	2.12E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Propanoate metabolism	23	2.08	2	6.30E-01	2.01E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.04
Aminoacyl-tRNA biosynthesis	48	4.34	4	6.44E-01	1.91E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Lysine degradation	25	2.26	2	6.76E-01	1.70E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.15
Alanine, aspartate and glutamate metabolism	28	2.53	2	7.36E-01	1.33E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.05
Arginine biosynthesis	14	1.26	1	7.36E-01	1.33E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.06
Tyrosine metabolism	42	3.79	3	7.48E-01	1.26E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.11
Glycine, serine and threonine metabolism	33	2.98	2	8.15E-01	8.88E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Cysteine and methionine metabolism	33	2.98	2	8.15E-01	8.88E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.06
Purine metabolism	65	5.87	4	8.55E-01	6.79E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.16
Sphingolipid metabolism	21	1.90	1	8.65E-01	6.30E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Steroid hormone biosynthesis	85	7.68	5	8.98E-01	4.66E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.17
Tryptophan metabolism	41	3.70	2	8.99E-01	4.65E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Glutathione metabolism	28	2.53	1	9.31E-01	3.10E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Porphyrin and chlorophyll metabolism	30	2.71	1	9.43E-01	2.54E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Arachidonic acid metabolism	36	3.25	1	9.68E-01	1.40E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.12
Drug metabolism - other enzymes	39	3.52	1	9.76E-01	1.04E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.05
Metabolism of xenobiotics by cytochrome P450	68	6.14	1	9.99E-01	5.98E-04	1.00E+00	1.00E+00	0.00



## 6 Appendix: R Command History

```
[1] "mSet<-InitDataObjects(\"conc\", \"pathora\", FALSE)"
[2] "compd.vec<-c(\"HMDB0004983\", \"HMDB0062030\", \"HMDB0040145\", \"HMDB0013742\", \"HMDB0034245\", \"")
[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)"
[10] "mSet<-PlotKEGGPath(mSet, \"Valine, leucine and isoleucine biosynthesis\", 528, 480, \"png\", NU
[11] "mSet<-RerenderMetPAGraph(mSet, \"zoom1621884282858.png\", 528.0, 480.0, 100.0)"
[12] "mSet<-SaveTransformedData(mSet)"
[13] "mSet<-PreparePDFReport(mSet, \"guest6398557114152749881\")\n"
```

---

The report was generated on Mon May 24 15:24:56 2021 with R version 4.0.2 (2020-06-22).