

Metabolomic Data Analysis with MetaboAnalyst 5.0

Name: guest16707543552910373811

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*

Table 1: Result

	Query	Match	HMDB	PubChem	KEGG
1	HMDB0166738	NA	NA	NA	NA
2	HMDB0164724	NA	NA	NA	NA
3	HMDB0165094	NA	NA	NA	NA
4	HMDB0165096	NA	NA	NA	NA
5	HMDB0165095	NA	NA	NA	NA
6	HMDB0165097	NA	NA	NA	NA
7	HMDB0166737	NA	NA	NA	NA
8	HMDB0031484	2-Heptenoic acid	HMDB0031484	5282709	
9	HMDB0038962	NA	NA	NA	NA
10	HMDB0031500	Methyl 2E-hexenoate	HMDB0031500	5364409	
11	HMDB0166739	NA	NA	NA	NA
12	HMDB0029314	Isopentenyl acetate	HMDB0029314	14489	
13	HMDB0031477	3,4-Heptanedione	HMDB0031477	83671	
14	HMDB0031476	2,3-Heptanedione	HMDB0031476	60983	
15	HMDB0031504	Methyl (Z)-3-hexenoate	HMDB0031504	5362819	
16	HMDB0031603	Ethyl 4-pentenoate	HMDB0031603	74786	
17	HMDB0040214	NA	NA	NA	NA
18	HMDB0031342	Cyclohexanecarboxylic acid	HMDB0031342	7413	C09822
19	HMDB0038271	NA	NA	NA	NA
20	HMDB0031174	4-Methyl-5-hexanolide	HMDB0031174	544628	
21	HMDB0031681	Dihydro-5-propyl-2(3H)-furanone	HMDB0031681	7742	
22	HMDB0033793	4-Heptenoic acid	HMDB0033793	5312595	
23	HMDB0031593	5-Methyl-2,3-hexanedione	HMDB0031593	26204	
24	HMDB0039819	NA	NA	NA	NA
25	HMDB0166736	NA	NA	NA	NA
26	HMDB0173760	NA	NA	NA	NA
27	HMDB0173761	NA	NA	NA	NA
28	HMDB0173762	NA	NA	NA	NA
29	HMDB0173763	NA	NA	NA	NA
30	HMDB0180322	NA	NA	NA	NA
31	HMDB0180323	NA	NA	NA	NA
32	HMDB0029165	1,3-Diacetylpropane	HMDB0029165	100532	
33	HMDB0031351	Cyclohexyl formate	HMDB0031351	20358	
34	HMDB0032460	4-Pentenyl acetate	HMDB0032460	74096	
35	HMDB0032391	3-Methyl-3-butenyl acetate	HMDB0032391	78879	
36	HMDB0030330	1-Methoxy-3-methylene-2-pentanone	HMDB0030330	13932051	
37	HMDB0059876	NA	NA	NA	NA
38	HMDB0040591	NA	NA	NA	NA
39	HMDB0145113	NA	NA	NA	NA
40	HMDB0145114	NA	NA	NA	NA
41	HMDB0145115	NA	NA	NA	NA
42	HMDB0145125	NA	NA	NA	NA
43	HMDB0145116	NA	NA	NA	NA
44	HMDB0094649	2-Amino-heptanoic acid	HMDB0094649	5312965	
45	HMDB0001161	4-Trimethylammonibutanoic acid	HMDB0001161	134	C01181
46	HMDB0006831	3-Dehydroxycarnitine	HMDB0006831	725	C05543
47	HMDB0000895	Acetylcholine	HMDB0000895	6060	C01996
48	HMDB0013811	1-Nitroheptane	HMDB0013811		
49	HMDB0060747	NA	NA	NA	NA
50	HMDB0011754	Methyldopa	HMDB0011754	38853	C07194
51	HMDB0001434	3-Methoxytyrosine	HMDB0001434	1670	
52	HMDB0125096	NA	NA	NA	NA
53	HMDB0125588	NA	NA	NA	NA
54	HMDB0166608	NA	NA	NA	NA
55	HMDB0125524	NA	NA	NA	NA
56	HMDB0142175	NA	NA	NA	NA
57	HMDB0141263	NA	NA	NA	NA
58	HMDB0141265	NA	NA	NA	NA
59	HMDB0140957	NA	NA	NA	NA

60	HMDB0137510	NA	NA	NA	NA
61	HMDB0131171	NA	NA	NA	NA
62	HMDB0131172	NA	NA	NA	NA
63	HMDB0131173	NA	NA	NA	NA
64	HMDB0131137	NA	NA	NA	NA
65	HMDB0146403	NA	NA	NA	NA
66	HMDB0146628	NA	NA	NA	NA
67	HMDB0146629	NA	NA	NA	NA
68	HMDB0178262	NA	NA	NA	NA
69	HMDB0166614	NA	NA	NA	NA
70	HMDB0166613	NA	NA	NA	NA
71	HMDB0166609	NA	NA	NA	NA
72	HMDB0166611	NA	NA	NA	NA
73	HMDB0166607	NA	NA	NA	NA
74	HMDB0154365	NA	NA	NA	NA
75	HMDB0146630	NA	NA	NA	NA
76	HMDB0127500	NA	NA	NA	NA
77	HMDB0032652	Meconine	HMDB0032652	68437	
78	HMDB0061686	NA	NA	NA	NA
79	HMDB0059721	NA	NA	NA	NA
80	HMDB0165533	NA	NA	NA	NA
81	HMDB0240705	NA	NA	NA	NA
82	HMDB0032614	Piperonyl acetate	HMDB0032614	9473	
83	HMDB0029663	Vanillin acetate	HMDB0029663	61229	
84	HMDB0135741	NA	NA	NA	NA
85	HMDB0037644	NA	NA	NA	NA
86	HMDB0002120	Monoethyl phthalate	HMDB0002120	75318	
87	HMDB0000955	Isoferulic acid	HMDB0000955	736186	C10470
88	HMDB0000954	trans-Ferulic acid	HMDB0000954	445858	C01494
89	HMDB0134088	NA	NA	NA	NA
90	HMDB0039606	NA	NA	NA	NA
91	HMDB0030765	(-)-trans-3,4-Dihydro-4,8-dihydroxy-3-methyl-1H-2-benzopyran-1-one	HMDB0030765	169539	
92	HMDB0036604	NA	NA	NA	NA
93	HMDB0240627	NA	NA	NA	NA
94	HMDB0094722	NA	NA	NA	NA
95	HMDB0062181	NA	NA	NA	NA
96	HMDB0094719	NA	NA	NA	NA
97	HMDB0094718	NA	NA	NA	NA
98	HMDB0094720	NA	NA	NA	NA
99	HMDB0094721	NA	NA	NA	NA
100	HMDB0014991	Temozolomide	HMDB0014991	5394	
101	HMDB0166750	NA	NA	NA	NA
102	HMDB0175186	NA	NA	NA	NA
103	HMDB0061189	NA	NA	NA	NA
104	HMDB0062555	hydroxyisovaleroyl carnitine	HMDB0062555	57357187	
105	HMDB0240421	NA	NA	NA	NA
106	HMDB0040904	NA	NA	NA	NA
107	HMDB0168550	NA	NA	NA	NA
108	HMDB0168551	NA	NA	NA	NA
109	HMDB0168552	NA	NA	NA	NA
110	HMDB0168553	NA	NA	NA	NA
111	HMDB0168554	NA	NA	NA	NA
112	HMDB0168549	NA	NA	NA	NA
113	HMDB0137260	NA	NA	NA	NA
114	HMDB0137271	NA	NA	NA	NA
115	HMDB0030974	8-Acetoxy-4-acoren-3-one	HMDB0030974	85288994	
116	HMDB0031928	Panaxytriol	HMDB0031928	93484	C16792
117	HMDB0030801	1-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)-3-decanone	HMDB0030801	94378	C10482
118	HMDB0039251	NA	NA	NA	NA
119	HMDB0134775	NA	NA	NA	NA
120	HMDB0038798	NA	NA	NA	NA
121	HMDB0035075	Tanacetol B	HMDB0035075	131751660	
122	HMDB0060952	NA	NA	NA	NA
123	HMDB0014521	Palonosetron	HMDB0014521	148211	
124	HMDB0030283	Hydrocinchonine	HMDB0030283	101711	
125	HMDB0037839	NA	NA	NA	NA
126	HMDB0029089	Tryptophyl-Methionine	HMDB0029089	7020173	
127	HMDB0028984	Methionyl-Tryptophan	HMDB0028984	3080870	
128	HMDB0000489	Aspartylglycosamine	HMDB0000489	123826	C04540
129	HMDB0136315	NA	NA	NA	NA
130	HMDB0136311	NA	NA	NA	NA
131	HMDB0136314	NA	NA	NA	NA
132	HMDB0136313	NA	NA	NA	NA
133	HMDB0136316	NA	NA	NA	NA
134	HMDB0005037	Sumatriptan	HMDB0005037	5358	C07319
135	HMDB0153675	NA	NA	NA	NA
136	HMDB0153676	NA	NA	NA	NA
137	HMDB0151629	NA	NA	NA	NA
138	HMDB0151909	NA	NA	NA	NA
139	HMDB0153670	NA	NA	NA	NA
140	HMDB0153672	NA	NA	NA	NA
141	HMDB0153671	NA	NA	NA	NA
142	HMDB0153674	NA	NA	NA	NA
143	HMDB0146373	NA	NA	NA	NA
144	HMDB0140280	NA	NA	NA	NA
145	HMDB0136509	NA	NA	NA	NA
146	HMDB0130773	NA	NA	NA	NA

147	HMDB0130772	NA	NA	NA	NA
148	HMDB0130769	NA	NA	NA	NA
149	HMDB0130768	NA	NA	NA	NA
150	HMDB0130580	NA	NA	NA	NA
151	HMDB0138454	NA	NA	NA	NA
152	HMDB0130574	NA	NA	NA	NA
153	HMDB0130573	NA	NA	NA	NA
154	HMDB0130576	NA	NA	NA	NA
155	HMDB0130899	NA	NA	NA	NA
156	HMDB0132853	NA	NA	NA	NA
157	HMDB0134815	NA	NA	NA	NA
158	HMDB0133983	NA	NA	NA	NA
159	HMDB0133985	NA	NA	NA	NA
160	HMDB0133980	NA	NA	NA	NA
161	HMDB0133300	NA	NA	NA	NA
162	HMDB0133299	NA	NA	NA	NA
163	HMDB0132915	NA	NA	NA	NA
164	HMDB0132911	NA	NA	NA	NA
165	HMDB0132909	NA	NA	NA	NA
166	HMDB0130569	NA	NA	NA	NA
167	HMDB0130570	NA	NA	NA	NA
168	HMDB0130578	NA	NA	NA	NA
169	HMDB0146408	NA	NA	NA	NA
170	HMDB0146435	NA	NA	NA	NA
171	HMDB0147284	NA	NA	NA	NA
172	HMDB0147288	NA	NA	NA	NA
173	HMDB0150246	NA	NA	NA	NA
174	HMDB0150244	NA	NA	NA	NA
175	HMDB0151165	NA	NA	NA	NA
176	HMDB0146372	NA	NA	NA	NA
177	HMDB0130397	NA	NA	NA	NA
178	HMDB0130393	NA	NA	NA	NA
179	HMDB0130373	NA	NA	NA	NA
180	HMDB0130370	NA	NA	NA	NA
181	HMDB0130369	NA	NA	NA	NA
182	HMDB0128539	NA	NA	NA	NA
183	HMDB0126073	NA	NA	NA	NA
184	HMDB0140838	NA	NA	NA	NA
185	HMDB0140839	NA	NA	NA	NA
186	HMDB0151166	NA	NA	NA	NA
187	HMDB0130571	NA	NA	NA	NA
188	HMDB0030875	2',4-Dihydroxy-4',6'-dimethoxychalcone	HMDB0030875	6293081	
189	HMDB0033861	3-Hydroxy-2,9-dimethoxypterocarpan	HMDB0033861	12218868	
190	HMDB0034116	Homopisatin	HMDB0034116	627142	
191	HMDB0033142	Melilotocarpin A	HMDB0033142	4484393	C00542
192	HMDB0041321	NA	NA	NA	NA
193	HMDB0038812	NA	NA	NA	NA
194	HMDB0033292	8-Hydroxy-3,9-dimethoxypterocarpan	HMDB0033292	454891	
195	HMDB0031421	Heliannone B	HMDB0031421	10851748	
196	HMDB0038110	NA	NA	NA	NA
197	HMDB0034008	Methylnissolin	HMDB0034008	5319733	
198	HMDB0031705	Heliannone A	HMDB0031705	5357345	
199	HMDB0041322	NA	NA	NA	NA
200	HMDB0034001	3-Hydroxy-4,9-dimethoxypterocarpan	HMDB0034001	14077265	
201	HMDB0130378	NA	NA	NA	NA
202	HMDB0140279	NA	NA	NA	NA
203	HMDB0130568	NA	NA	NA	NA
204	HMDB0140278	NA	NA	NA	NA
205	HMDB0030341	Pipltartine	HMDB0030341	637858	C10166
206	HMDB0137020	NA	NA	NA	NA
207	HMDB0137023	NA	NA	NA	NA
208	HMDB0137024	NA	NA	NA	NA
209	HMDB0137022	NA	NA	NA	NA
210	HMDB0137025	NA	NA	NA	NA
211	HMDB0137027	NA	NA	NA	NA
212	HMDB0137026	NA	NA	NA	NA
213	HMDB0137021	NA	NA	NA	NA
214	HMDB0136330	NA	NA	NA	NA
215	HMDB0136329	NA	NA	NA	NA
216	HMDB0136327	NA	NA	NA	NA
217	HMDB0136328	NA	NA	NA	NA
218	HMDB0136326	NA	NA	NA	NA
219	HMDB0136325	NA	NA	NA	NA
220	HMDB0185679	NA	NA	NA	NA
221	HMDB0185658	NA	NA	NA	NA
222	HMDB0185694	NA	NA	NA	NA
223	HMDB0185682	NA	NA	NA	NA
224	HMDB0185676	NA	NA	NA	NA
225	HMDB0185661	NA	NA	NA	NA
226	HMDB0185673	NA	NA	NA	NA
227	HMDB0185698	NA	NA	NA	NA
228	HMDB0185670	NA	NA	NA	NA
229	HMDB0185667	NA	NA	NA	NA
230	HMDB0185664	NA	NA	NA	NA
231	HMDB0179611	NA	NA	NA	NA
232	HMDB0179614	NA	NA	NA	NA
233	HMDB0179608	NA	NA	NA	NA

234	HMDB0179615	NA	NA	NA	NA
235	HMDB0179605	NA	NA	NA	NA
236	HMDB0179606	NA	NA	NA	NA
237	HMDB0179618	NA	NA	NA	NA
238	HMDB0179619	NA	NA	NA	NA
239	HMDB0179623	NA	NA	NA	NA
240	HMDB0179626	NA	NA	NA	NA
241	HMDB0182175	NA	NA	NA	NA
242	HMDB0179627	NA	NA	NA	NA
243	HMDB0182176	NA	NA	NA	NA
244	HMDB0014334	Bortezomib	HMDB0014334	387447	
245	HMDB0061005	NA	NA	NA	NA
246	HMDB0060583	NA	NA	NA	NA
247	HMDB0030868	Citreoviridin A	HMDB0030868	45934448	
248	HMDB0030523	Citreoviridin C	HMDB0030523	131751044	
249	HMDB0036462	NA	NA	NA	NA
250	HMDB0035027	Melleolide F	HMDB0035027	14166118	
251	HMDB0035774	Armillyl orsellinate	HMDB0035774	14707323	
252	HMDB0015459	Cortisone acetate	HMDB0015459	5745	C08173
253	HMDB0038917	NA	NA	NA	NA
254	HMDB0031380	(6beta,7alpha,12beta,13beta)-7-Hydroxy-11,16-dioxo-8,14-apianadien-22,6-olide	HMDB0031380	73880583	
255	HMDB0179899	NA	NA	NA	NA
256	HMDB0179900	NA	NA	NA	NA
257	HMDB0179898	NA	NA	NA	NA
258	HMDB0179897	NA	NA	NA	NA
259	HMDB0179895	NA	NA	NA	NA
260	HMDB0179894	NA	NA	NA	NA
261	HMDB0179893	NA	NA	NA	NA
262	HMDB0179896	NA	NA	NA	NA
263	HMDB0002126	27-Nor-5b-cholestane-3a,7a,12a,24,25-pentol	HMDB0002126	21252278	
264	HMDB0036883	NA	NA	NA	NA
265	HMDB0175472	NA	NA	NA	NA
266	HMDB0170465	NA	NA	NA	NA
267	HMDB0167392	NA	NA	NA	NA
268	HMDB0170466	NA	NA	NA	NA
269	HMDB0030180	Crustecdysone	HMDB0030180	271605	C02633
270	HMDB0170469	NA	NA	NA	NA
271	HMDB0170467	NA	NA	NA	NA
272	HMDB0170468	NA	NA	NA	NA
273	HMDB0240232	NA	NA	NA	NA
274	HMDB0171796	NA	NA	NA	NA
275	HMDB0171795	NA	NA	NA	NA
276	HMDB0171797	NA	NA	NA	NA
277	HMDB0171798	NA	NA	NA	NA
278	HMDB0170648	NA	NA	NA	NA
279	HMDB0170654	NA	NA	NA	NA
280	HMDB0170645	NA	NA	NA	NA
281	HMDB0170653	NA	NA	NA	NA
282	HMDB0170658	NA	NA	NA	NA
283	HMDB0170657	NA	NA	NA	NA
284	HMDB0170656	NA	NA	NA	NA
285	HMDB0170649	NA	NA	NA	NA
286	HMDB0170652	NA	NA	NA	NA
287	HMDB0170647	NA	NA	NA	NA
288	HMDB0170646	NA	NA	NA	NA
289	HMDB0170655	NA	NA	NA	NA
290	HMDB0158633	NA	NA	NA	NA
291	HMDB0158234	NA	NA	NA	NA
292	HMDB0158235	NA	NA	NA	NA
293	HMDB0158642	NA	NA	NA	NA
294	HMDB0158238	NA	NA	NA	NA
295	HMDB0158621	NA	NA	NA	NA
296	HMDB0158636	NA	NA	NA	NA
297	HMDB0158629	NA	NA	NA	NA
298	HMDB0158625	NA	NA	NA	NA
299	HMDB0158226	NA	NA	NA	NA
300	HMDB0158231	NA	NA	NA	NA
301	HMDB0158228	NA	NA	NA	NA
302	HMDB0157580	NA	NA	NA	NA
303	HMDB0158210	NA	NA	NA	NA
304	HMDB0158213	NA	NA	NA	NA
305	HMDB0158219	NA	NA	NA	NA
306	HMDB0158216	NA	NA	NA	NA
307	HMDB0158221	NA	NA	NA	NA
308	HMDB0158223	NA	NA	NA	NA
309	HMDB0158225	NA	NA	NA	NA
310	HMDB0158639	NA	NA	NA	NA
311	HMDB0158646	NA	NA	NA	NA
312	HMDB0158643	NA	NA	NA	NA
313	HMDB0169111	NA	NA	NA	NA
314	HMDB0171254	NA	NA	NA	NA
315	HMDB0171269	NA	NA	NA	NA
316	HMDB0171253	NA	NA	NA	NA
317	HMDB0171257	NA	NA	NA	NA
318	HMDB0171258	NA	NA	NA	NA
319	HMDB0171264	NA	NA	NA	NA
320	HMDB0171268	NA	NA	NA	NA

321	HMDB0171273	NA	NA	NA	NA
322	HMDB0171272	NA	NA	NA	NA
323	HMDB0169110	NA	NA	NA	NA
324	HMDB0169105	NA	NA	NA	NA
325	HMDB0169108	NA	NA	NA	NA
326	HMDB0158650	NA	NA	NA	NA
327	HMDB0158654	NA	NA	NA	NA
328	HMDB0158656	NA	NA	NA	NA
329	HMDB0158660	NA	NA	NA	NA
330	HMDB0169095	NA	NA	NA	NA
331	HMDB0169099	NA	NA	NA	NA
332	HMDB0169097	NA	NA	NA	NA
333	HMDB0169101	NA	NA	NA	NA
334	HMDB0169103	NA	NA	NA	NA
335	HMDB0169107	NA	NA	NA	NA
336	HMDB0033412	Gibberellin A20 13-glucoside	HMDB0033412	14258563	
337	HMDB0037084	NA	NA	NA	NA
338	HMDB0038610	NA	NA	NA	NA
339	HMDB0171261	NA	NA	NA	NA
340	HMDB0015181	Fluocinonide	HMDB0015181	9642	C07007
341	HMDB0140090	NA	NA	NA	NA
342	HMDB0033177	Sapiol	HMDB0033177	185639	
343	HMDB0038738	NA	NA	NA	NA
344	HMDB0157582	NA	NA	NA	NA
345	HMDB0179952	NA	NA	NA	NA
346	HMDB0179953	NA	NA	NA	NA
347	HMDB0174900	NA	NA	NA	NA
348	HMDB0167227	NA	NA	NA	NA
349	HMDB0167180	NA	NA	NA	NA
350	HMDB0035700	Lucidenic acid J	HMDB0035700	131751851	
351	HMDB0167212	NA	NA	NA	NA
352	HMDB0167174	NA	NA	NA	NA
353	HMDB0167200	NA	NA	NA	NA
354	HMDB0167223	NA	NA	NA	NA
355	HMDB0167220	NA	NA	NA	NA
356	HMDB0167217	NA	NA	NA	NA
357	HMDB0167216	NA	NA	NA	NA
358	HMDB0167195	NA	NA	NA	NA
359	HMDB0167213	NA	NA	NA	NA
360	HMDB0167206	NA	NA	NA	NA
361	HMDB0167209	NA	NA	NA	NA
362	HMDB0167203	NA	NA	NA	NA
363	HMDB0167186	NA	NA	NA	NA
364	HMDB0167183	NA	NA	NA	NA
365	HMDB0167177	NA	NA	NA	NA
366	HMDB0167189	NA	NA	NA	NA
367	HMDB0167192	NA	NA	NA	NA
368	HMDB0167196	NA	NA	NA	NA
369	HMDB0167197	NA	NA	NA	NA
370	HMDB0173045	NA	NA	NA	NA
371	HMDB0015393	Darunavir	HMDB0015393	213039	
372	HMDB0168629	NA	NA	NA	NA
373	HMDB0168628	NA	NA	NA	NA
374	HMDB0161739	NA	NA	NA	NA
375	HMDB0161740	NA	NA	NA	NA
376	HMDB0011491	LysoPE(0:0/22:1(13Z))	HMDB0011491	53480940	
377	HMDB0011521	LysoPE(22:1(13Z)/0:0)	HMDB0011521	53480953	
378	HMDB0166691	NA	NA	NA	NA
379	HMDB0183450	NA	NA	NA	NA
380	HMDB0183448	NA	NA	NA	NA
381	HMDB0183454	NA	NA	NA	NA
382	HMDB0183392	NA	NA	NA	NA
383	HMDB0184230	NA	NA	NA	NA
384	HMDB0184231	NA	NA	NA	NA
385	HMDB0184233	NA	NA	NA	NA
386	HMDB0184235	NA	NA	NA	NA
387	HMDB0184236	NA	NA	NA	NA
388	HMDB0184261	NA	NA	NA	NA
389	HMDB0183451	NA	NA	NA	NA
390	HMDB0183395	NA	NA	NA	NA
391	HMDB0183394	NA	NA	NA	NA
392	HMDB0183374	NA	NA	NA	NA
393	HMDB0183376	NA	NA	NA	NA
394	HMDB0183377	NA	NA	NA	NA
395	HMDB0183378	NA	NA	NA	NA
396	HMDB0183380	NA	NA	NA	NA
397	HMDB0183379	NA	NA	NA	NA
398	HMDB0183382	NA	NA	NA	NA
399	HMDB0183384	NA	NA	NA	NA
400	HMDB0183386	NA	NA	NA	NA
401	HMDB0171784	NA	NA	NA	NA
402	HMDB0171783	NA	NA	NA	NA
403	HMDB0035943	Cyclopassifloic acid A	HMDB0035943	73800244	
404	HMDB0033635	Cyclotricuspidogenin C	HMDB0033635	73801615	
405	HMDB0035945	Cyclopassifloic acid C	HMDB0035945	73800246	
406	HMDB0015079	Demecarium	HMDB0015079	5966	
407	HMDB0061700	NA	NA	NA	NA

408	HMDB0062711	NA	NA	NA	NA
409	HMDB0010386	LysoPC(18:2(9Z,12Z))	HMDB0010386	11005824	C04230
410	HMDB0184827	NA	NA	NA	NA
411	HMDB0062478	NA	NA	NA	NA
412	HMDB0060155	NA	NA	NA	NA
413	HMDB0013061	S-(PGA1)-glutathione	HMDB0013061	53481601	
414	HMDB0013060	S-(9-hydroxy-PGA2)-glutathione	HMDB0013060	53481600	
415	HMDB0013057	S-(9-deoxy-delta12-PGD2)-glutathione	HMDB0013057	53481597	
416	HMDB0013056	S-(11-OH-9-deoxy-delta9,12-PGD2)-glutathione	HMDB0013056	53481596	
417	HMDB0183885	NA	NA	NA	NA
418	HMDB0183879	NA	NA	NA	NA
419	HMDB0183878	NA	NA	NA	NA
420	HMDB0183884	NA	NA	NA	NA
421	HMDB0001198	Leukotriene C4	HMDB0001198	5283134	C02166
422	HMDB0183882	NA	NA	NA	NA
423	HMDB0005095	11-trans-Leukotriene C4	HMDB0005095	5283134	C02166
424	HMDB0183888	NA	NA	NA	NA
425	HMDB0183887	NA	NA	NA	NA
426	HMDB0183881	NA	NA	NA	NA
427	HMDB0178719	NA	NA	NA	NA
428	HMDB0178728	NA	NA	NA	NA
429	HMDB0178720	NA	NA	NA	NA
430	HMDB0178718	NA	NA	NA	NA
431	HMDB0178717	NA	NA	NA	NA
432	HMDB0178729	NA	NA	NA	NA
433	HMDB0178730	NA	NA	NA	NA
434	HMDB0178727	NA	NA	NA	NA
435	HMDB0160619	NA	NA	NA	NA
436	HMDB0160620	NA	NA	NA	NA
437	HMDB0160617	NA	NA	NA	NA
438	HMDB0160616	NA	NA	NA	NA
439	HMDB0173931	NA	NA	NA	NA
440	HMDB0173932	NA	NA	NA	NA
441	HMDB0014351	Reserpine	HMDB0014351	5770	C06539
442	HMDB0030172	Oxyacanthine	HMDB0030172	371257	C09598
443	HMDB0015330	Tubocurarine	HMDB0015330	6000	C07547
444	HMDB0061667	NA	NA	NA	NA
445	HMDB0061671	NA	NA	NA	NA
446	HMDB0112234	NA	NA	NA	NA
447	HMDB0112220	NA	NA	NA	NA
448	HMDB0177552	NA	NA	NA	NA
449	HMDB0177551	NA	NA	NA	NA
450	HMDB0177553	NA	NA	NA	NA
451	HMDB0177554	NA	NA	NA	NA
452	HMDB0040155	NA	NA	NA	NA
453	HMDB0039887	NA	NA	NA	NA
454	HMDB0166973	NA	NA	NA	NA
455	HMDB0099701	NA	NA	NA	NA
456	HMDB0100257	NA	NA	NA	NA
457	HMDB0100256	NA	NA	NA	NA
458	HMDB0100259	NA	NA	NA	NA
459	HMDB0100936	NA	NA	NA	NA
460	HMDB0100935	NA	NA	NA	NA
461	HMDB0100937	NA	NA	NA	NA
462	HMDB0100938	NA	NA	NA	NA
463	HMDB0100939	NA	NA	NA	NA
464	HMDB0100940	NA	NA	NA	NA
465	HMDB0101013	NA	NA	NA	NA
466	HMDB0101011	NA	NA	NA	NA
467	HMDB0101012	NA	NA	NA	NA
468	HMDB0101010	NA	NA	NA	NA
469	HMDB0101014	NA	NA	NA	NA
470	HMDB0101015	NA	NA	NA	NA
471	HMDB0101107	NA	NA	NA	NA
472	HMDB0100258	NA	NA	NA	NA
473	HMDB0071838	NA	NA	NA	NA
474	HMDB0099980	NA	NA	NA	NA
475	HMDB0099703	NA	NA	NA	NA
476	HMDB0099702	NA	NA	NA	NA
477	HMDB0099704	NA	NA	NA	NA
478	HMDB0099707	NA	NA	NA	NA
479	HMDB0099705	NA	NA	NA	NA
480	HMDB0099706	NA	NA	NA	NA
481	HMDB0099710	NA	NA	NA	NA
482	HMDB0099711	NA	NA	NA	NA
483	HMDB0099708	NA	NA	NA	NA
484	HMDB0099709	NA	NA	NA	NA
485	HMDB0099712	NA	NA	NA	NA
486	HMDB0099975	NA	NA	NA	NA
487	HMDB0099976	NA	NA	NA	NA
488	HMDB0099978	NA	NA	NA	NA
489	HMDB0099977	NA	NA	NA	NA
490	HMDB0099979	NA	NA	NA	NA
491	HMDB0101106	NA	NA	NA	NA
492	HMDB0101108	NA	NA	NA	NA
493	HMDB0101293	NA	NA	NA	NA
494	HMDB0101290	NA	NA	NA	NA

495	HMDB0101292	NA	NA	NA	NA
496	HMDB0101291	NA	NA	NA	NA
497	HMDB0101294	NA	NA	NA	NA
498	HMDB0101297	NA	NA	NA	NA
499	HMDB0101295	NA	NA	NA	NA
500	HMDB0101296	NA	NA	NA	NA
501	HMDB0101298	NA	NA	NA	NA
502	HMDB0101300	NA	NA	NA	NA
503	HMDB0101301	NA	NA	NA	NA
504	HMDB0101299	NA	NA	NA	NA
505	HMDB0101302	NA	NA	NA	NA
506	HMDB0101304	NA	NA	NA	NA
507	HMDB0101303	NA	NA	NA	NA
508	HMDB0101305	NA	NA	NA	NA
509	HMDB0101289	NA	NA	NA	NA
510	HMDB0101288	NA	NA	NA	NA
511	HMDB0101287	NA	NA	NA	NA
512	HMDB0101110	NA	NA	NA	NA
513	HMDB0101109	NA	NA	NA	NA
514	HMDB0101111	NA	NA	NA	NA
515	HMDB0101114	NA	NA	NA	NA
516	HMDB0101112	NA	NA	NA	NA
517	HMDB0101113	NA	NA	NA	NA
518	HMDB0101115	NA	NA	NA	NA
519	HMDB0101116	NA	NA	NA	NA
520	HMDB0101117	NA	NA	NA	NA
521	HMDB0101281	NA	NA	NA	NA
522	HMDB0101280	NA	NA	NA	NA
523	HMDB0101282	NA	NA	NA	NA
524	HMDB0101285	NA	NA	NA	NA
525	HMDB0101284	NA	NA	NA	NA
526	HMDB0101283	NA	NA	NA	NA
527	HMDB0101286	NA	NA	NA	NA
528	HMDB0101306	NA	NA	NA	NA
529	HMDB0097388	NA	NA	NA	NA
530	HMDB0097627	NA	NA	NA	NA
531	HMDB0097628	NA	NA	NA	NA
532	HMDB0098047	NA	NA	NA	NA
533	HMDB0098046	NA	NA	NA	NA
534	HMDB0098051	NA	NA	NA	NA
535	HMDB0098048	NA	NA	NA	NA
536	HMDB0098050	NA	NA	NA	NA
537	HMDB0098049	NA	NA	NA	NA
538	HMDB0098388	NA	NA	NA	NA
539	HMDB0098391	NA	NA	NA	NA
540	HMDB0098389	NA	NA	NA	NA
541	HMDB0098390	NA	NA	NA	NA
542	HMDB0098392	NA	NA	NA	NA
543	HMDB0098393	NA	NA	NA	NA
544	HMDB0099211	NA	NA	NA	NA
545	HMDB0099209	NA	NA	NA	NA
546	HMDB0097626	NA	NA	NA	NA
547	HMDB0097624	NA	NA	NA	NA
548	HMDB0097625	NA	NA	NA	NA
549	HMDB0097389	NA	NA	NA	NA
550	HMDB0097390	NA	NA	NA	NA
551	HMDB0097391	NA	NA	NA	NA
552	HMDB0097392	NA	NA	NA	NA
553	HMDB0097395	NA	NA	NA	NA
554	HMDB0097394	NA	NA	NA	NA
555	HMDB0097393	NA	NA	NA	NA
556	HMDB0097396	NA	NA	NA	NA
557	HMDB0097397	NA	NA	NA	NA
558	HMDB0097619	NA	NA	NA	NA
559	HMDB0097617	NA	NA	NA	NA
560	HMDB0097618	NA	NA	NA	NA
561	HMDB0097620	NA	NA	NA	NA
562	HMDB0097621	NA	NA	NA	NA
563	HMDB0097622	NA	NA	NA	NA
564	HMDB0097623	NA	NA	NA	NA
565	HMDB0099210	NA	NA	NA	NA
566	HMDB0099212	NA	NA	NA	NA
567	HMDB0099454	NA	NA	NA	NA
568	HMDB0099455	NA	NA	NA	NA
569	HMDB0099456	NA	NA	NA	NA
570	HMDB0099457	NA	NA	NA	NA
571	HMDB0099459	NA	NA	NA	NA
572	HMDB0099458	NA	NA	NA	NA
573	HMDB0099463	NA	NA	NA	NA
574	HMDB0099460	NA	NA	NA	NA
575	HMDB0099461	NA	NA	NA	NA
576	HMDB0099462	NA	NA	NA	NA
577	HMDB0099464	NA	NA	NA	NA
578	HMDB0099599	NA	NA	NA	NA
579	HMDB0099600	NA	NA	NA	NA
580	HMDB0099602	NA	NA	NA	NA
581	HMDB0099603	NA	NA	NA	NA

582	HMDB0099601	NA	NA	NA	NA
583	HMDB0099453	NA	NA	NA	NA
584	HMDB0099337	NA	NA	NA	NA
585	HMDB0099338	NA	NA	NA	NA
586	HMDB0099259	NA	NA	NA	NA
587	HMDB0099261	NA	NA	NA	NA
588	HMDB0099260	NA	NA	NA	NA
589	HMDB0099263	NA	NA	NA	NA
590	HMDB0099262	NA	NA	NA	NA
591	HMDB0099264	NA	NA	NA	NA
592	HMDB0099327	NA	NA	NA	NA
593	HMDB0099328	NA	NA	NA	NA
594	HMDB0099329	NA	NA	NA	NA
595	HMDB0099331	NA	NA	NA	NA
596	HMDB0099330	NA	NA	NA	NA
597	HMDB0099332	NA	NA	NA	NA
598	HMDB0099333	NA	NA	NA	NA
599	HMDB0099335	NA	NA	NA	NA
600	HMDB0099334	NA	NA	NA	NA
601	HMDB0099336	NA	NA	NA	NA
602	HMDB0099604	NA	NA	NA	NA
603	HMDB0105231	NA	NA	NA	NA
604	HMDB0105396	NA	NA	NA	NA
605	HMDB0105395	NA	NA	NA	NA
606	HMDB0105830	NA	NA	NA	NA
607	HMDB0105832	NA	NA	NA	NA
608	HMDB0105831	NA	NA	NA	NA
609	HMDB0105834	NA	NA	NA	NA
610	HMDB0105833	NA	NA	NA	NA
611	HMDB0105835	NA	NA	NA	NA
612	HMDB0106274	NA	NA	NA	NA
613	HMDB0106275	NA	NA	NA	NA
614	HMDB0106276	NA	NA	NA	NA
615	HMDB0106278	NA	NA	NA	NA
616	HMDB0106277	NA	NA	NA	NA
617	HMDB0106279	NA	NA	NA	NA
618	HMDB0107824	NA	NA	NA	NA
619	HMDB0107825	NA	NA	NA	NA
620	HMDB0105397	NA	NA	NA	NA
621	HMDB0105393	NA	NA	NA	NA
622	HMDB0105394	NA	NA	NA	NA
623	HMDB0105232	NA	NA	NA	NA
624	HMDB0105233	NA	NA	NA	NA
625	HMDB0105235	NA	NA	NA	NA
626	HMDB0105306	NA	NA	NA	NA
627	HMDB0105305	NA	NA	NA	NA
628	HMDB0105309	NA	NA	NA	NA
629	HMDB0105308	NA	NA	NA	NA
630	HMDB0105307	NA	NA	NA	NA
631	HMDB0105310	NA	NA	NA	NA
632	HMDB0105386	NA	NA	NA	NA
633	HMDB0105387	NA	NA	NA	NA
634	HMDB0105390	NA	NA	NA	NA
635	HMDB0105389	NA	NA	NA	NA
636	HMDB0105388	NA	NA	NA	NA
637	HMDB0105391	NA	NA	NA	NA
638	HMDB0105392	NA	NA	NA	NA
639	HMDB0107826	NA	NA	NA	NA
640	HMDB0107827	NA	NA	NA	NA
641	HMDB0108348	NA	NA	NA	NA
642	HMDB0109549	NA	NA	NA	NA
643	HMDB0109550	NA	NA	NA	NA
644	HMDB0109551	NA	NA	NA	NA
645	HMDB0109552	NA	NA	NA	NA
646	HMDB0109602	NA	NA	NA	NA
647	HMDB0109599	NA	NA	NA	NA
648	HMDB0109601	NA	NA	NA	NA
649	HMDB0109600	NA	NA	NA	NA
650	HMDB0109659	NA	NA	NA	NA
651	HMDB0109662	NA	NA	NA	NA
652	HMDB0109660	NA	NA	NA	NA
653	HMDB0109661	NA	NA	NA	NA
654	HMDB0109955	NA	NA	NA	NA
655	HMDB0109956	NA	NA	NA	NA
656	HMDB0109958	NA	NA	NA	NA
657	HMDB0108347	NA	NA	NA	NA
658	HMDB0108346	NA	NA	NA	NA
659	HMDB0108349	NA	NA	NA	NA
660	HMDB0107829	NA	NA	NA	NA
661	HMDB0107828	NA	NA	NA	NA
662	HMDB0107874	NA	NA	NA	NA
663	HMDB0107876	NA	NA	NA	NA
664	HMDB0107878	NA	NA	NA	NA
665	HMDB0107875	NA	NA	NA	NA
666	HMDB0107877	NA	NA	NA	NA
667	HMDB0107879	NA	NA	NA	NA
668	HMDB0108054	NA	NA	NA	NA

669	HMDB0108052	NA	NA	NA	NA
670	HMDB0108053	NA	NA	NA	NA
671	HMDB0108055	NA	NA	NA	NA
672	HMDB0108057	NA	NA	NA	NA
673	HMDB0108056	NA	NA	NA	NA
674	HMDB0108344	NA	NA	NA	NA
675	HMDB0108345	NA	NA	NA	NA
676	HMDB0109957	NA	NA	NA	NA
677	HMDB0101527	NA	NA	NA	NA
678	HMDB0102355	NA	NA	NA	NA
679	HMDB0102357	NA	NA	NA	NA
680	HMDB0102356	NA	NA	NA	NA
681	HMDB0102358	NA	NA	NA	NA
682	HMDB0103501	NA	NA	NA	NA
683	HMDB0103500	NA	NA	NA	NA
684	HMDB0103504	NA	NA	NA	NA
685	HMDB0103502	NA	NA	NA	NA
686	HMDB0103503	NA	NA	NA	NA
687	HMDB0103505	NA	NA	NA	NA
688	HMDB0103550	NA	NA	NA	NA
689	HMDB0103551	NA	NA	NA	NA
690	HMDB0103552	NA	NA	NA	NA
691	HMDB0103553	NA	NA	NA	NA
692	HMDB0103554	NA	NA	NA	NA
693	HMDB0103555	NA	NA	NA	NA
694	HMDB0102354	NA	NA	NA	NA
695	HMDB0102353	NA	NA	NA	NA
696	HMDB0101932	NA	NA	NA	NA
697	HMDB0101526	NA	NA	NA	NA
698	HMDB0101528	NA	NA	NA	NA
699	HMDB0101529	NA	NA	NA	NA
700	HMDB0101530	NA	NA	NA	NA
701	HMDB0101531	NA	NA	NA	NA
702	HMDB0101534	NA	NA	NA	NA
703	HMDB0101533	NA	NA	NA	NA
704	HMDB0101532	NA	NA	NA	NA
705	HMDB0101536	NA	NA	NA	NA
706	HMDB0101535	NA	NA	NA	NA
707	HMDB0101537	NA	NA	NA	NA
708	HMDB0101930	NA	NA	NA	NA
709	HMDB0101929	NA	NA	NA	NA
710	HMDB0101928	NA	NA	NA	NA
711	HMDB0101933	NA	NA	NA	NA
712	HMDB0101931	NA	NA	NA	NA
713	HMDB0103608	NA	NA	NA	NA
714	HMDB0103612	NA	NA	NA	NA
715	HMDB0103732	NA	NA	NA	NA
716	HMDB0103734	NA	NA	NA	NA
717	HMDB0103735	NA	NA	NA	NA
718	HMDB0104014	NA	NA	NA	NA
719	HMDB0104015	NA	NA	NA	NA
720	HMDB0104016	NA	NA	NA	NA
721	HMDB0104018	NA	NA	NA	NA
722	HMDB0104017	NA	NA	NA	NA
723	HMDB0104019	NA	NA	NA	NA
724	HMDB0104275	NA	NA	NA	NA
725	HMDB0104278	NA	NA	NA	NA
726	HMDB0104276	NA	NA	NA	NA
727	HMDB0104277	NA	NA	NA	NA
728	HMDB0104279	NA	NA	NA	NA
729	HMDB0104280	NA	NA	NA	NA
730	HMDB0105230	NA	NA	NA	NA
731	HMDB0103733	NA	NA	NA	NA
732	HMDB0103731	NA	NA	NA	NA
733	HMDB0103730	NA	NA	NA	NA
734	HMDB0103609	NA	NA	NA	NA
735	HMDB0103610	NA	NA	NA	NA
736	HMDB0103611	NA	NA	NA	NA
737	HMDB0103613	NA	NA	NA	NA
738	HMDB0103616	NA	NA	NA	NA
739	HMDB0103615	NA	NA	NA	NA
740	HMDB0103614	NA	NA	NA	NA
741	HMDB0103617	NA	NA	NA	NA
742	HMDB0103618	NA	NA	NA	NA
743	HMDB0103619	NA	NA	NA	NA
744	HMDB0103724	NA	NA	NA	NA
745	HMDB0103725	NA	NA	NA	NA
746	HMDB0103727	NA	NA	NA	NA
747	HMDB0103726	NA	NA	NA	NA
748	HMDB0103728	NA	NA	NA	NA
749	HMDB0103729	NA	NA	NA	NA
750	HMDB0105234	NA	NA	NA	NA
751	HMDB0071940	NA	NA	NA	NA
752	HMDB0072157	NA	NA	NA	NA
753	HMDB0072188	NA	NA	NA	NA
754	HMDB0072197	NA	NA	NA	NA
755	HMDB0072209	NA	NA	NA	NA

756	HMDB0072238	NA	NA	NA	NA
757	HMDB0072246	NA	NA	NA	NA
758	HMDB0072249	NA	NA	NA	NA
759	HMDB0072265	NA	NA	NA	NA
760	HMDB0072286	NA	NA	NA	NA
761	HMDB0072287	NA	NA	NA	NA
762	HMDB0072293	NA	NA	NA	NA
763	HMDB0072316	NA	NA	NA	NA
764	HMDB0072320	NA	NA	NA	NA
765	HMDB0072336	NA	NA	NA	NA
766	HMDB0072364	NA	NA	NA	NA
767	HMDB0072368	NA	NA	NA	NA
768	HMDB0072153	NA	NA	NA	NA
769	HMDB0072143	NA	NA	NA	NA
770	HMDB0071965	NA	NA	NA	NA
771	HMDB0071966	NA	NA	NA	NA
772	HMDB0071983	NA	NA	NA	NA
773	HMDB0071989	NA	NA	NA	NA
774	HMDB0071990	NA	NA	NA	NA
775	HMDB0071997	NA	NA	NA	NA
776	HMDB0072012	NA	NA	NA	NA
777	HMDB0072022	NA	NA	NA	NA
778	HMDB0072035	NA	NA	NA	NA
779	HMDB0072064	NA	NA	NA	NA
780	HMDB0072076	NA	NA	NA	NA
781	HMDB0072090	NA	NA	NA	NA
782	HMDB0072117	NA	NA	NA	NA
783	HMDB0072124	NA	NA	NA	NA
784	HMDB0072141	NA	NA	NA	NA
785	HMDB0072142	NA	NA	NA	NA
786	HMDB0072385	NA	NA	NA	NA
787	HMDB0072408	NA	NA	NA	NA
788	HMDB0072718	NA	NA	NA	NA
789	HMDB0072747	NA	NA	NA	NA
790	HMDB0072804	NA	NA	NA	NA
791	HMDB0072825	NA	NA	NA	NA
792	HMDB0072832	NA	NA	NA	NA
793	HMDB0094865	NA	NA	NA	NA
794	HMDB0094866	NA	NA	NA	NA
795	HMDB0094870	NA	NA	NA	NA
796	HMDB0094867	NA	NA	NA	NA
797	HMDB0094868	NA	NA	NA	NA
798	HMDB0094869	NA	NA	NA	NA
799	HMDB0094918	NA	NA	NA	NA
800	HMDB0094917	NA	NA	NA	NA
801	HMDB0094919	NA	NA	NA	NA
802	HMDB0094988	NA	NA	NA	NA
803	HMDB0094992	NA	NA	NA	NA
804	HMDB0072644	NA	NA	NA	NA
805	HMDB0072642	NA	NA	NA	NA
806	HMDB0072410	NA	NA	NA	NA
807	HMDB0072422	NA	NA	NA	NA
808	HMDB0072438	NA	NA	NA	NA
809	HMDB0072442	NA	NA	NA	NA
810	HMDB0072451	NA	NA	NA	NA
811	HMDB0072470	NA	NA	NA	NA
812	HMDB0072496	NA	NA	NA	NA
813	HMDB0072501	NA	NA	NA	NA
814	HMDB0072532	NA	NA	NA	NA
815	HMDB0072534	NA	NA	NA	NA
816	HMDB0072536	NA	NA	NA	NA
817	HMDB0072549	NA	NA	NA	NA
818	HMDB0072563	NA	NA	NA	NA
819	HMDB0072597	NA	NA	NA	NA
820	HMDB0072609	NA	NA	NA	NA
821	HMDB0072607	NA	NA	NA	NA
822	HMDB0094990	NA	NA	NA	NA
823	HMDB0094920	NA	NA	NA	NA
824	HMDB0065069	NA	NA	NA	NA
825	HMDB0065114	NA	NA	NA	NA
826	HMDB0065342	NA	NA	NA	NA
827	HMDB0065682	NA	NA	NA	NA
828	HMDB0065826	NA	NA	NA	NA
829	HMDB0065952	NA	NA	NA	NA
830	HMDB0065955	NA	NA	NA	NA
831	HMDB0066219	NA	NA	NA	NA
832	HMDB0066300	NA	NA	NA	NA
833	HMDB0069739	NA	NA	NA	NA
834	HMDB0071120	NA	NA	NA	NA
835	HMDB0071134	NA	NA	NA	NA
836	HMDB0071167	NA	NA	NA	NA
837	HMDB0071170	NA	NA	NA	NA
838	HMDB0071171	NA	NA	NA	NA
839	HMDB0071183	NA	NA	NA	NA
840	HMDB0065009	NA	NA	NA	NA
841	HMDB0064992	NA	NA	NA	NA
842	HMDB0062962	NA	NA	NA	NA

843	HMDB0063275	NA	NA	NA	NA
844	HMDB0063341	NA	NA	NA	NA
845	HMDB0063426	NA	NA	NA	NA
846	HMDB0063610	NA	NA	NA	NA
847	HMDB0063687	NA	NA	NA	NA
848	HMDB0064065	NA	NA	NA	NA
849	HMDB0064153	NA	NA	NA	NA
850	HMDB0064175	NA	NA	NA	NA
851	HMDB0064236	NA	NA	NA	NA
852	HMDB0064416	NA	NA	NA	NA
853	HMDB0064499	NA	NA	NA	NA
854	HMDB0064579	NA	NA	NA	NA
855	HMDB0064593	NA	NA	NA	NA
856	HMDB0064788	NA	NA	NA	NA
857	HMDB0064975	NA	NA	NA	NA
858	HMDB0071229	NA	NA	NA	NA
859	HMDB0071265	NA	NA	NA	NA
860	HMDB0071627	NA	NA	NA	NA
861	HMDB0071675	NA	NA	NA	NA
862	HMDB0071692	NA	NA	NA	NA
863	HMDB0071701	NA	NA	NA	NA
864	HMDB0071717	NA	NA	NA	NA
865	HMDB0071721	NA	NA	NA	NA
866	HMDB0071749	NA	NA	NA	NA
867	HMDB0071787	NA	NA	NA	NA
868	HMDB0071811	NA	NA	NA	NA
869	HMDB0071862	NA	NA	NA	NA
870	HMDB0071865	NA	NA	NA	NA
871	HMDB0071863	NA	NA	NA	NA
872	HMDB0071878	NA	NA	NA	NA
873	HMDB0071881	NA	NA	NA	NA
874	HMDB0071912	NA	NA	NA	NA
875	HMDB0071920	NA	NA	NA	NA
876	HMDB0071620	NA	NA	NA	NA
877	HMDB0071549	NA	NA	NA	NA
878	HMDB0071266	NA	NA	NA	NA
879	HMDB0071267	NA	NA	NA	NA
880	HMDB0071289	NA	NA	NA	NA
881	HMDB0071349	NA	NA	NA	NA
882	HMDB0071348	NA	NA	NA	NA
883	HMDB0071394	NA	NA	NA	NA
884	HMDB0071405	NA	NA	NA	NA
885	HMDB0071435	NA	NA	NA	NA
886	HMDB0071446	NA	NA	NA	NA
887	HMDB0071468	NA	NA	NA	NA
888	HMDB0071478	NA	NA	NA	NA
889	HMDB0071486	NA	NA	NA	NA
890	HMDB0071495	NA	NA	NA	NA
891	HMDB0071504	NA	NA	NA	NA
892	HMDB0071528	NA	NA	NA	NA
893	HMDB0071539	NA	NA	NA	NA
894	HMDB0071924	NA	NA	NA	NA
895	HMDB0096157	NA	NA	NA	NA
896	HMDB0096818	NA	NA	NA	NA
897	HMDB0096819	NA	NA	NA	NA
898	HMDB0096816	NA	NA	NA	NA
899	HMDB0096820	NA	NA	NA	NA
900	HMDB0096821	NA	NA	NA	NA
901	HMDB0096822	NA	NA	NA	NA
902	HMDB0096981	NA	NA	NA	NA
903	HMDB0096982	NA	NA	NA	NA
904	HMDB0096983	NA	NA	NA	NA
905	HMDB0096987	NA	NA	NA	NA
906	HMDB0096985	NA	NA	NA	NA
907	HMDB0096984	NA	NA	NA	NA
908	HMDB0096986	NA	NA	NA	NA
909	HMDB0096991	NA	NA	NA	NA
910	HMDB0096990	NA	NA	NA	NA
911	HMDB0096988	NA	NA	NA	NA
912	HMDB0096817	NA	NA	NA	NA
913	HMDB0096814	NA	NA	NA	NA
914	HMDB0096623	NA	NA	NA	NA
915	HMDB0096622	NA	NA	NA	NA
916	HMDB0096624	NA	NA	NA	NA
917	HMDB0096625	NA	NA	NA	NA
918	HMDB0096627	NA	NA	NA	NA
919	HMDB0096626	NA	NA	NA	NA
920	HMDB0096703	NA	NA	NA	NA
921	HMDB0096700	NA	NA	NA	NA
922	HMDB0096701	NA	NA	NA	NA
923	HMDB0096702	NA	NA	NA	NA
924	HMDB0096705	NA	NA	NA	NA
925	HMDB0096704	NA	NA	NA	NA
926	HMDB0096811	NA	NA	NA	NA
927	HMDB0096813	NA	NA	NA	NA
928	HMDB0096812	NA	NA	NA	NA
929	HMDB0096815	NA	NA	NA	NA

930	HMDB0096989	NA	NA	NA	NA
931	HMDB0096992	NA	NA	NA	NA
932	HMDB0097208	NA	NA	NA	NA
933	HMDB0097210	NA	NA	NA	NA
934	HMDB0097209	NA	NA	NA	NA
935	HMDB0097212	NA	NA	NA	NA
936	HMDB0097213	NA	NA	NA	NA
937	HMDB0097215	NA	NA	NA	NA
938	HMDB0097214	NA	NA	NA	NA
939	HMDB0097216	NA	NA	NA	NA
940	HMDB0097217	NA	NA	NA	NA
941	HMDB0097380	NA	NA	NA	NA
942	HMDB0097382	NA	NA	NA	NA
943	HMDB0097383	NA	NA	NA	NA
944	HMDB0097381	NA	NA	NA	NA
945	HMDB0097384	NA	NA	NA	NA
946	HMDB0097386	NA	NA	NA	NA
947	HMDB0097387	NA	NA	NA	NA
948	HMDB0097211	NA	NA	NA	NA
949	HMDB0097207	NA	NA	NA	NA
950	HMDB0096995	NA	NA	NA	NA
951	HMDB0096993	NA	NA	NA	NA
952	HMDB0096994	NA	NA	NA	NA
953	HMDB0096996	NA	NA	NA	NA
954	HMDB0096997	NA	NA	NA	NA
955	HMDB0096999	NA	NA	NA	NA
956	HMDB0096998	NA	NA	NA	NA
957	HMDB0097000	NA	NA	NA	NA
958	HMDB0097002	NA	NA	NA	NA
959	HMDB0097003	NA	NA	NA	NA
960	HMDB0097001	NA	NA	NA	NA
961	HMDB0097004	NA	NA	NA	NA
962	HMDB0097007	NA	NA	NA	NA
963	HMDB0097005	NA	NA	NA	NA
964	HMDB0097006	NA	NA	NA	NA
965	HMDB0097206	NA	NA	NA	NA
966	HMDB0097385	NA	NA	NA	NA
967	HMDB0096156	NA	NA	NA	NA
968	HMDB0094991	NA	NA	NA	NA
969	HMDB0095128	NA	NA	NA	NA
970	HMDB0095129	NA	NA	NA	NA
971	HMDB0095258	NA	NA	NA	NA
972	HMDB0095260	NA	NA	NA	NA
973	HMDB0095259	NA	NA	NA	NA
974	HMDB0095264	NA	NA	NA	NA
975	HMDB0095261	NA	NA	NA	NA
976	HMDB0095262	NA	NA	NA	NA
977	HMDB0095263	NA	NA	NA	NA
978	HMDB0095268	NA	NA	NA	NA
979	HMDB0095265	NA	NA	NA	NA
980	HMDB0095266	NA	NA	NA	NA
981	HMDB0095267	NA	NA	NA	NA
982	HMDB0095269	NA	NA	NA	NA
983	HMDB0095379	NA	NA	NA	NA
984	HMDB0095124	NA	NA	NA	NA
985	HMDB0095126	NA	NA	NA	NA
986	HMDB0095127	NA	NA	NA	NA
987	HMDB0094989	NA	NA	NA	NA
988	HMDB0094993	NA	NA	NA	NA
989	HMDB0094994	NA	NA	NA	NA
990	HMDB0094995	NA	NA	NA	NA
991	HMDB0094996	NA	NA	NA	NA
992	HMDB0094997	NA	NA	NA	NA
993	HMDB0094999	NA	NA	NA	NA
994	HMDB0094998	NA	NA	NA	NA
995	HMDB0095119	NA	NA	NA	NA
996	HMDB0095118	NA	NA	NA	NA
997	HMDB0095122	NA	NA	NA	NA
998	HMDB0095121	NA	NA	NA	NA
999	HMDB0095123	NA	NA	NA	NA
1000	HMDB0095120	NA	NA	NA	NA
1001	HMDB0095125	NA	NA	NA	NA
1002	HMDB0095378	NA	NA	NA	NA
1003	HMDB0095380	NA	NA	NA	NA
1004	HMDB0096155	NA	NA	NA	NA
1005	HMDB0095538	NA	NA	NA	NA
1006	HMDB0095539	NA	NA	NA	NA
1007	HMDB0095644	NA	NA	NA	NA
1008	HMDB0095645	NA	NA	NA	NA
1009	HMDB0095649	NA	NA	NA	NA
1010	HMDB0095648	NA	NA	NA	NA
1011	HMDB0095647	NA	NA	NA	NA
1012	HMDB0095646	NA	NA	NA	NA
1013	HMDB0095928	NA	NA	NA	NA
1014	HMDB0095926	NA	NA	NA	NA
1015	HMDB0095925	NA	NA	NA	NA
1016	HMDB0095927	NA	NA	NA	NA

1017	HMDB0096153	NA	NA	NA	NA
1018	HMDB0096154	NA	NA	NA	NA
1019	HMDB0096158	NA	NA	NA	NA
1020	HMDB0095537	NA	NA	NA	NA
1021	HMDB0095536	NA	NA	NA	NA
1022	HMDB0095534	NA	NA	NA	NA
1023	HMDB0095382	NA	NA	NA	NA
1024	HMDB0095384	NA	NA	NA	NA
1025	HMDB0095381	NA	NA	NA	NA
1026	HMDB0095383	NA	NA	NA	NA
1027	HMDB0095385	NA	NA	NA	NA
1028	HMDB0095386	NA	NA	NA	NA
1029	HMDB0095387	NA	NA	NA	NA
1030	HMDB0095388	NA	NA	NA	NA
1031	HMDB0095389	NA	NA	NA	NA
1032	HMDB0095535	NA	NA	NA	NA
1033	HMDB0095531	NA	NA	NA	NA
1034	HMDB0095532	NA	NA	NA	NA
1035	HMDB0095533	NA	NA	NA	NA
1036	HMDB0095530	NA	NA	NA	NA
1037	HMDB0095529	NA	NA	NA	NA
1038	HMDB0095528	NA	NA	NA	NA
1039	HMDB0182265	NA	NA	NA	NA
1040	HMDB0182264	NA	NA	NA	NA
1041	HMDB0182266	NA	NA	NA	NA
1042	HMDB0164217	NA	NA	NA	NA
1043	HMDB0164215	NA	NA	NA	NA
1044	HMDB0038059	NA	NA	NA	NA
1045	HMDB0012092	SM(d18:0/22:1(13Z))	HMDB0012092	53481362	C00550
1046	HMDB0012103	SM(d18:1/22:0)	HMDB0012103	44260125	C00550
1047	HMDB0061669	NA	NA	NA	NA
1048	HMDB0112209	NA	NA	NA	NA
1049	HMDB0042752	NA	NA	NA	NA
1050	HMDB0043401	NA	NA	NA	NA
1051	HMDB0042975	NA	NA	NA	NA
1052	HMDB0042982	NA	NA	NA	NA
1053	HMDB0043177	NA	NA	NA	NA
1054	HMDB0047755	NA	NA	NA	NA
1055	HMDB0042542	NA	NA	NA	NA
1056	HMDB0042114	NA	NA	NA	NA
1057	HMDB0042107	NA	NA	NA	NA
1058	HMDB0034699	Fumonisin A2	HMDB0034699	14077782	
1059	HMDB0148903	NA	NA	NA	NA
1060	HMDB0148904	NA	NA	NA	NA
1061	HMDB0167769	NA	NA	NA	NA
1062	HMDB0167768	NA	NA	NA	NA
1063	HMDB0173103	NA	NA	NA	NA
1064	HMDB0169616	NA	NA	NA	NA
1065	HMDB0165411	NA	NA	NA	NA
1066	HMDB0173104	NA	NA	NA	NA
1067	HMDB0164420	NA	NA	NA	NA
1068	HMDB0164423	NA	NA	NA	NA
1069	HMDB0164424	NA	NA	NA	NA
1070	HMDB0164421	NA	NA	NA	NA
1071	HMDB0164422	NA	NA	NA	NA
1072	HMDB0164419	NA	NA	NA	NA
1073	HMDB0164418	NA	NA	NA	NA
1074	HMDB0046646	NA	NA	NA	NA
1075	HMDB0051659	NA	NA	NA	NA
1076	HMDB0054167	NA	NA	NA	NA
1077	HMDB0047434	NA	NA	NA	NA
1078	HMDB0054486	NA	NA	NA	NA
1079	HMDB0051643	NA	NA	NA	NA
1080	HMDB0047682	NA	NA	NA	NA
1081	HMDB0047505	NA	NA	NA	NA
1082	HMDB0046964	NA	NA	NA	NA
1083	HMDB0051851	NA	NA	NA	NA
1084	HMDB0047664	NA	NA	NA	NA
1085	HMDB0047452	NA	NA	NA	NA
1086	HMDB0052106	NA	NA	NA	NA
1087	HMDB0047643	NA	NA	NA	NA
1088	HMDB0052227	NA	NA	NA	NA
1089	HMDB0052101	NA	NA	NA	NA
1090	HMDB0052196	NA	NA	NA	NA
1091	HMDB0051508	NA	NA	NA	NA
1092	HMDB0051995	NA	NA	NA	NA
1093	HMDB0053728	NA	NA	NA	NA
1094	HMDB0052137	NA	NA	NA	NA
1095	HMDB0047429	NA	NA	NA	NA
1096	HMDB0051638	NA	NA	NA	NA
1097	HMDB0052242	NA	NA	NA	NA
1098	HMDB0046946	NA	NA	NA	NA
1099	HMDB0047515	NA	NA	NA	NA
1100	HMDB0046821	NA	NA	NA	NA
1101	HMDB0046773	NA	NA	NA	NA
1102	HMDB0046604	NA	NA	NA	NA
1103	HMDB0046215	NA	NA	NA	NA

1104	HMDB0045865	NA	NA	NA	NA
1105	HMDB0050816	NA	NA	NA	NA
1106	HMDB0050577	NA	NA	NA	NA
1107	HMDB0050431	NA	NA	NA	NA
1108	HMDB0047291	NA	NA	NA	NA
1109	HMDB0052248	NA	NA	NA	NA
1110	HMDB0046778	NA	NA	NA	NA
1111	HMDB0051756	NA	NA	NA	NA
1112	HMDB0054393	NA	NA	NA	NA
1113	HMDB0050721	NA	NA	NA	NA
1114	HMDB0050582	NA	NA	NA	NA
1115	HMDB0050986	NA	NA	NA	NA
1116	HMDB0053352	NA	NA	NA	NA
1117	HMDB0053450	NA	NA	NA	NA
1118	HMDB0053347	NA	NA	NA	NA
1119	HMDB0054407	NA	NA	NA	NA
1120	HMDB0051772	NA	NA	NA	NA
1121	HMDB0047521	NA	NA	NA	NA
1122	HMDB0047544	NA	NA	NA	NA
1123	HMDB0054472	NA	NA	NA	NA
1124	HMDB0047308	NA	NA	NA	NA
1125	HMDB0052256	NA	NA	NA	NA
1126	HMDB0054398	NA	NA	NA	NA
1127	HMDB0051782	NA	NA	NA	NA
1128	HMDB0051867	NA	NA	NA	NA
1129	HMDB0052323	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

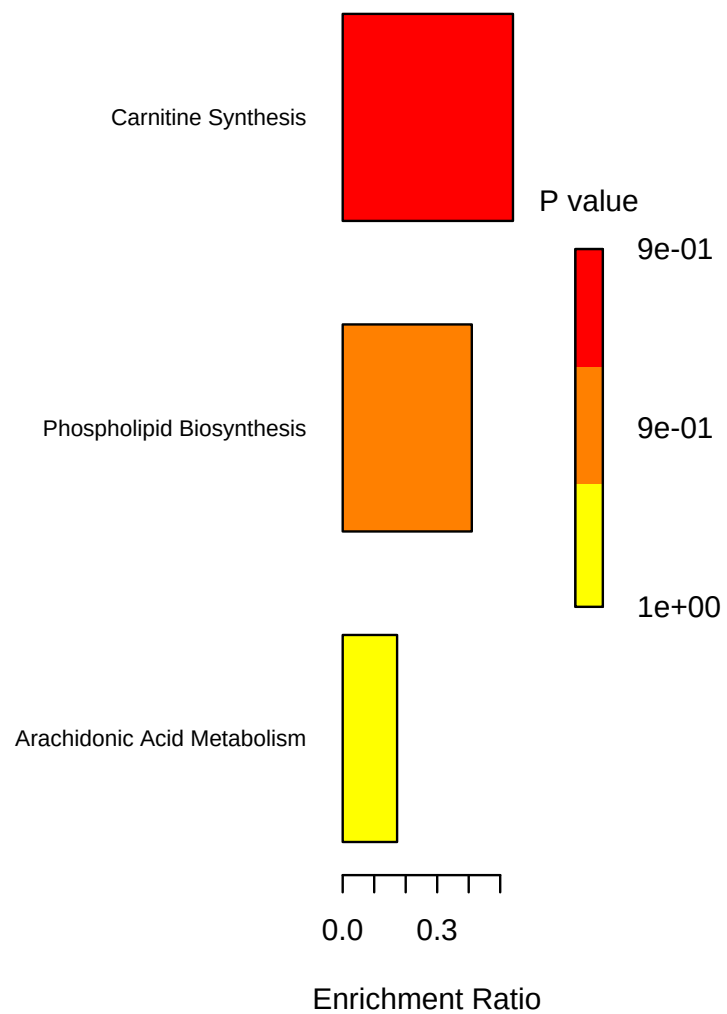


Figure 1: Summary Plot for Over Representation Analysis (ORA)

Table 2: Result from Over Representation Analysis

	total	expected	hits	Raw p	Holm p	FDR
Carnitine Synthesis	22	1.85	1	8.58E-01	1.00E+00	1.00E+00
Phospholipid Biosynthesis	29	2.44	1	9.24E-01	1.00E+00	1.00E+00
Arachidonic Acid Metabolism	69	5.79	1	9.98E-01	1.00E+00	1.00E+00

7 Appendix: R Command History

```
[1] "mSet<-InitDataObjects(\"conc\", \"pathora\", FALSE)"
[2] "compd.vec<-c(\"HMDB0166738\", \"HMDB0164724\", \"HMDB0165094\", \"HMDB0165096\", \"HMDB0165095\", \"HMDB0165097\")"
[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<-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, \"guest16707543552910373811\")\\n"
```

The report was generated on Mon May 24 12:47:43 2021 with R version 4.0.2 (2020-06-22).