

Supplementary data 2

```
#!/bin/bash
```

```
output="Resultados.data"
```

```
rm $output
```

```
awk -F= '{ if (/<=>/) {print $1, $2} else {print $2}}' $1 > productos.data
```

```
awk -F= '{ if (/<=>/) {print $1, $2} else {print $1}}' $1 > reactivos.data
```

```
cat productos.data | sed 's/> //g' | sed 's/ <\n/g' | sed 's/ + \n/g' | sed 's/^[0-9]* //g' >  
productos1.data
```

```
sort productos1.data | uniq -c >> $output
```

```
sort productos1.data | uniq > productosfinal.data
```

```
cat reactivos.data | sed 's/ < //g' | sed 's/> \n/g' | sed 's/ + \n/g' | sed 's/^[0-9]* //g' | sed 's/  
*$/g' > reactivos1.data
```

```
sort reactivos1.data | uniq -c >> $output
```

```
sort reactivos1.data | uniq > reactivosfinal.data
```

```
echo -e "\n*****Metabolitos Desconectados*****" >> $output
```

```
cat productosfinal.data reactivosfinal.data > msc.txt
```

```
cat msc.txt | sort | uniq -u >> $output
```