

**Supplementary Table 1 The differentially expressed metabolites between  
The healthy controls and drug-induced liver injury groups**

Positive mode	Negative mode
2-Hydroxycinnamic acid	Methylmalonic acid
5-Aminovaleric acid	2-Hydroxyvaleric acid
N-Benzylformamide	2-Isopropylmalic acid
Indole-3-acetic acid	N-Acetyl-D-alloisoleucine
Proline	N-Acetyl-L-phenylalanine
Acetyl-L-carnitine	3'-Adenosine monophosphate (3'-AMP)
Betaine	Dodecanedioic acid
Coumarin	Testosterone sulfate
DL-Carnitine	2'-Deoxyinosine
D-(+)-Proline	Adenosine 3'5'-cyclic monophosphate
DL-Arginine	Glycocholic acid (2S)-4-Oxo-2-phenyl-3,4-dihydro-2H -chromen-7-yl beta-D-glucopyranoside
Propionylcarnitine	DL-4-Hydroxyphenyllactic acid
Pipecolic acid	DL-4-Hydroxyphenyllactic acid
Methyl indole-3-acetate	o-Toluic Acid
Glycine anhydride	P-Toluenesulfonic acid
N-Acetyl-L-leucine	Glycoursodeoxycholic acid
DL-2-(acetylamino)-3-phenylpropanoi c acid	(+/-)9-HpODE
Ecgonine	Mestranol
Hexanoylcarnitine	Corchorifatty acid F
4-Guanidinobutyric acid	(S)-2-Hydroxybutanoic acid
N-Acetylserotonin	Monobutyl phthalate

N3,N4-Dimethyl-L-arginine	12-Hydroxydodecanoic acid
6-Methylnicotinamide	(±)9-HpODE
Hypoxanthine	Chenodeoxycholic Acid
Nicotinic acid	Traumatic acid
Inosine	(+/-)12(13)-DiHOME
Adenosine 5'-monophosphate	alpha-Ketoglutaric acid
Pantothenic acid	2-Methoxyestrone
Kynurenic acid	L-Ascorbate
N6-Acetyl-L-lysine	Thr-Leu
Tiglic acid	N-Acetyl-DL-norvaline
N1-ethyl-4-methylbenzene-1-sulfonamide	3-Hydroxydecanoic acid
Palmitic Acid	Fumaric acid
Methyl palmitate	Equol
N-(5-Aminopentyl)acetamide	DL-α-Methoxyphenylacetic acid
4-oxo-5-phenylpentanoic acid	13,14-dihydro-15-keto-tetranor
Myristic acid	Prostaglandin F1β
L-Valine	15-Deoxy-Δ <sup>12,14</sup> -prostaglandin D2
Glycylproline	Prostaglandin A2
Acetylcholine	Hexadecanedioic acid
Methylimidazoleacetic acid	Octadeca-11E,13E,15Z-trienoic acid
(5Z)-3-aminonon-5-enoic acid	13,14-Dihydro-15-keto
L-Alanyl-L-proline	Prostaglandin E2
ethyl 2-amino-3-phenylpropanoate hydrochloride	Hydrocortisone
4-(1-adamantyl)-2-methyl-1,3-thiazole	Hexanoylglycine
Epigallocatechin	3-(4-benzyl-5-thioxo-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidin-2-one
	11-Epiprostaglandin E1
	2-[2-(5-bromo-2-pyridyl)diaz-1-enyl]

	-5-(diethylamino)phenol
Tetranor-12(S)-HETE	Tretinoin
Apocynin	Methyl EudesMate
Dihydrothymine	L-Glutathione oxidized diethyl
R-1 Methanandamide phosphate	2-[(2-morpholinoanilino)methylidene]malonate
5,6-dihydroxyindole	1-(4-Methoxyphenyl)-2-propanone
N-Acetylglycine	19(R)-Hydroxy prostaglandin F2 $\alpha$
2-Benzyl-5-[(3S)-1-isopropyl-3-pyrroli diny]-1,3,4-oxadiazole	13(S)-HOTrE
Trigonelline	Tetradecanedioic acid
Nitrosoheptamethyleneimine	Arachidonic acid
APK	Taurochenodeoxycholic acid
N-(5-acetamidopentyl)acetamide	N-Acetyl-L-tyrosine
N-Methylhydantoin	9-HpOTrE
N-Methylisoleucine	3-Indoleacrylic acid
7-Methylguanine	Methylmalonic acid
QNK	2-Hydroxyvaleric acid
Maltotetraose	2-Isopropylmalic acid
3-hydroxy-3-methylpentanedioic acid	N-Acetyl-D-alloisoleucine
Glutamic acid	N-Acetyl-L-phenylalanine
Cadaverine	3'-Adenosine          monophosphate (3'-AMP)
7-(2-hydroxypropan-2-yl)-1,4a-dimeth yl-decahydronaphthalen-1-ol	Dodecanedioic acid
(S)-beta-Aminoisobutyric Acid	Testosterone sulfate
DQH	2'-Deoxyinosine
3-Methyladipic acid	Adenosine                          3'5'-cyclic

	monophosphate
N-cyclohexyl-1-methyl-5-(1H-pyrrol-1-yl)-1H-pyrazole-4-carboxamide	Glycocholic acid
2-Methylpentanedioic acid	(2S)-4-Oxo-2-phenyl-3,4-dihydro-2H-chromen-7-yl
Ureidoisobutyric Acid	beta-D-glucopyranoside
Val-Ser	DL-4-Hydroxyphenyllactic acid
N,N-Dimethyldecylamine N-oxide	o-Toluic Acid
N-Acetylornithine	P-Toluenesulfonic acid
3-Methoxy prostaglandin F1 $\alpha$	Glycoursodeoxycholic acid
NG,NG-Dimethyl-L-arginine	(+/-)9-HpODE
4-(trifluoromethyl)nicotinic acid	Mestranol
(1R,2R)-trans-N-Boc-1,2-cyclohexanediamine	Corchorifatty acid F
UMP	(S)-2-Hydroxybutanoic acid
2-[2-[(1-methyl-1H-pyrazol-5-yl)amino]-2-oxoethoxy]acetic acid	Monobutyl phthalate
Adipamide	12-Hydroxydodecanoic acid
(2E,4E)-N-[2-(4-hydroxyphenyl)ethyl]dodeca-2,4-dienamide	( $\pm$ )9-HpODE
Desthiobiotin	Chenodeoxycholic Acid
Lasamide	Traumatic acid
Methyl dihydrojasmonate	(+/-)12(13)-DiHOME
Guanosine monophosphate	alpha-Ketoglutaric acid
16-Heptadecyne-1,2,4-triol	2-Methoxyestrone
N-Methylglutamic acid	L-Ascorbate
3-Methylcrotonylglycine	Thr-Leu
N-Acetylvaline	N-Acetyl-DL-norvaline
	3-Hydroxydecanoic acid

D-3-Phenyllactic acid	Fumaric acid
Arachidonoyl amide	Equol
NAT13-331713_POS	DL- $\alpha$ -Methoxyphenylacetic acid
4-Hydroxyisoleucine	13,14-dihydro-15-keto-tetranor
	Prostaglandin F1 $\beta$
Gamma-Aminobutyric acid	15-Deoxy- $\Delta$ 12,14-prostaglandin D2
1,3,5-Trimethylpyrazole	Prostaglandin A2
Capric acid	Hexadecanedioic acid
3-Methyladenine	Octadeca-11E,13E,15Z-trienoic acid
	13,14-Dihydro-15-keto
4-Hydroxy-3-methylbenzoic acid	Prostaglandin E2
2-(4-aminophenoxy)isophthalonitrile	Hydrocortisone
3-amino-4-(propylamino)cyclobut-3-ene-1,2-dione	Hexanoylglycine
	3-(4-benzyl-5-thioxo-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidin-2-one
4-morpholinobenzoic acid	11-Epiprostaglandin E1
Phosphoethanolamine	2-[2-(5-bromo-2-pyridyl)diaz-1-enyl]-5-(diethylamino)phenol
Choline Glycerophosphate	
3-methyl-5-oxo-5-(4-toluidino)pentanoic acid	Tretinoin
3-hydroxy-2-octylpentanedioic acid	Methyl EudesMate
1,4-dihydroxy-1,4-dimethyl-7-(propan-2-ylidene)-decahydroazulen-6-one	L-Glutathione oxidized
	diethyl
Metanephrine	2-[(2-morpholinoanilino)methylene]malonate
Tetramethylpyrazine	1-(4-Methoxyphenyl)-2-propanone
N1-tetrahydrofuran-2-ylmethyl-2-cyano	19(R)-Hydroxy prostaglandin F2 $\alpha$

noacetamide	
Zolpidem-d6	13(S)-HOTrE
4-heptyl-3-methyl-1H-pyrazol-5-ol	Tetradecanedioic acid
allantoate	Arachidonic acid
INK	Taurochenodeoxycholic acid
Nonanoic acid	N-Acetyl-L-tyrosine
Deflazacort	9-HpOTrE
11-Deoxy prostaglandin F1 $\alpha$	3-Indoleacrylic acid
L-Histidine	Methylmalonic acid
(+/-)-UR-144 N-(4-Hydroxypentyl) metabolite	2-Hydroxyvaleric acid
(+)-ar-Turmerone	2-Isopropylmalic acid
N-[[[(2R,4S,5R)-5-Ethyl-1-azabicyclo[2. 2.2]oct-2-yl]methyl]-2-furamide	N-Acetyl-D-alloisoleucine
2-[5-(2-hydroxypropyl)oxolan-2-yl]pr opanoic acid	N-Acetyl-L-phenylalanine
2-oxa-4-azatetracyclo[6.3.1.1~6,10~.0~ 1,5~]tridecan-3-one	3'-Adenosine monophosphate (3'-AMP)
3-hydroxyquinuclidine-3-carbonitrile hydrochloride	Dodecanedioic acid
3-isopropoxy-4-morpholinocyclobut-3 -ene-1,2-dione	Testosterone sulfate
Lysope 16:0	2'-Deoxyinosine
2-morpholino-1-phenyl-1-ethanol	Adenosine 3'5'-cyclic monophosphate
(2R)-2-[(2R,5S)-5-[(2S)-2-hydroxybutyl ]oxolan-2-yl]propanoic acid	Glycocholic acid
Prostaglandin G2	(2S)-4-Oxo-2-phenyl-3,4-dihydro-2H -chromen-7-yl

	beta-D-glucopyranoside
1-[4-(1-adamantyl)phenoxy]-3-piperid inopropan-2-ol hydrochloride	DL-4-Hydroxyphenyllactic acid
EPK	o-Toluic Acid
Nicorandil	P-Toluenesulfonic acid
N1-[6-hydroxy-2-(2-pyridyl)pyrimidin -4-yl]acetamide	Glycoursodeoxycholic acid
N~5~-(1,3,5-trimethyl-1H-pyrazol-4-yl )-1H-1,2,4-triazole-3,5-diamine	(+/-)9-HpODE
2-[(3S)-1-Cyclobutyl-3-pyrrolidiny]-1 H-imidazo[4,5-b]pyridine	Mestranol
1H-indol-3-yl(pyridin-2-yl)methanol	Corchorifatty acid F
NPH	(S)-2-Hydroxybutanoicacid
N-cyclooctylurea	Monobutyl phthalate
2-[(3S)-1-Benzyl-3-pyrrolidiny]-1,3-be nzothiazole	12-Hydroxydodecanoic acid
Prolylleucine	(±)9-HpODE
4',7-Dihydroxyflavanone	Chenodeoxycholic Acid
N alpha-Acetyl-L-Arginine	Traumatic acid
4-(3,4-dihydro-2H-1,5-benzodioxepin- 7-ylamino)-4-oxobutanoic acid	(+/-)12(13)-DiHOME
N-Acetylputrescine	alpha-Ketoglutaric acid
α-Lapachone	
13,14-dihydro Prostaglandin E1	
Citrinin	
Riboflavin	
Cytidine	
1,2-dihydroxyheptadec-16-yn-4-yl acetate	

N-(9-oxodecyl)acetamide  
5-(sec-butyl)-2-hydroxybenzaldehyde  
N-phenylhydrazone  
Noradrenaline  
N-Acetyl-L-histidine  
Testosterone  
N-(2-hydroxy-2-phenylethyl)-N'-(2-thienyl)urea  
5-(6-hydroxy-6-methyloctyl)-2,5-dihydrofuran-2-one  
ELK  
1-(2-pyridin-2-yl-diazenyl)-2-naphthol  
3-((5-Phenylloxazol-2-yl)amino)benzotrile  
Linoleic Acid (C18:2N6T)  
Prostaglandin F2 $\alpha$ -1-glycerol ester  
L-Carnitine  
N-Formylkynurenine  
4-(3-methoxy-5,6-dihydrobenzo[c]acridin-7-yl)morpholine  
Cyclohexylsulfamate  
2,2,5,5-tetramethyl-2,5-dihydro-1H-pyrrole-3-carboxamide  
(2E)-6-hydroxy-2-methyl-6-(4-methylphenyl)hept-2-enoic acid  
2-Deoxyuridine  
L-beta-Imidazolelactic acid  
Deoxyinosine  
methyl



6-[[4-(trifluoromethyl)anilino]carbonyl]nicotinate

6-phospho-D-glucono-1,5-lactone

Uric acid

Glutaric Acid

Prostaglandin H1

Prostaglandin A3

N-Acetyl-aspartic acid

L-Glutamic acid monosodium salt

Nicotinuric Acid

Taurine

Phenylpyruvic acid

D-Ala-D-Ala

Cytidine-5'-monophosphate

Boc-beta-cyano-L-alanine

Orsellinic acid ethyl ester

11-dehydro Thromboxane B2

**Supplementary Table 2 The results of the weighted metabolite coexpression network analysis**

subs		mod			MM.	p.M				p.M		p.M		p.M		
tanc		ule	GS.	p.G	turq	M.tu	MM	p.M	MM	M.y	MM	M.g	MM	M.b	MM	p.M
eBX	name	Col	gro	S.gr	uois	rquoi	.gre	M.g	.yell	ello	.gre	ree	.bro	row	.blu	M.b
H		or	up	oup	e	se	y	rey	ow	w	en	n	wn	n	e	lue
cg61	3-isopropoxy-4-morpholi		0.61				0.61		0.16		0.23	0.05	0.21		0.33	0.00
7	nocyclobut-3-ene-1,2-dion	blue	479	3.98	0.44	0.000	400	4.19	428	0.18	891	336	113	0.08	348	621
	e		188	E-0	0404	21513	907	E-0	117	7469	653	432	374	8806	012	450
			7	8	616	5	4	8	3	526	7	9	4	437	9	8
cg23			0.57	5.56	0.70		0.11	0.37	0.21		0.13	0.27	0.29		0.68	2.88
9	N-Acetyl-L-tyrosine	blue	094	E-0	6711	3.34E	166	204	124	0.08	760	054	146	0.01	203	E-1
			531	7	244	-11	776	136	889	8628	687	200	822	7574	092	0
							8	1	5	478	6	6	3	505	4	
cg37			0.55				0.30		0.27		0.27		0.57		0.65	1.86
4	Dihydrothymine	blue	608	1.25	0.53		0.01		305	0.02	646	0.02	594	4.20	847	E-0
			253	E-0	3931	3.90E	000	439	338	6537	212	463	624	E-07	476	9
			3	6	814	-06	778	038	2	757	7	573	2		6	

cg28 4	DL-2-(acetylamino)-3-phe nylpropanoic acid	blue	0.55				0.37	0.00		0.12	0.31	0.11		0.33	0.00	
			157	1.59	0.46		406	197	0.02	0.87	458	891	398	0.36	900	536
			229	E-0	6281	7.95E	961	439	022	1956	673	077	724	2127	850	159
			3	6	011	-05	3	8	345	846	6	5	6	654	8	2
cg27 8	Glycine anhydride	blue	0.54				0.29	0.01	0.26		0.31	0.00	0.44			
			370	2.38	0.53		401	656	929	0.02	984	884	902	0.00	0.61	3.13
			791	E-0	3468	3.99E	653	664	704	8775	660	575	777	0155	849	E-0
			8	6	839	-06	7	1	2	694	1	7	5	752	175	8
cg84	Monobutyl phthalate	blue	0.48				0.09	0.42		0.15	0.22	0.22		0.60		
			664	3.43	0.55		935	736	0.12	0.31	265	107	505	0.06	529	7.29
			856	E-0	7090	1.19E	441	797	490	7650	753	031	500	9246	564	E-0
			4	5	802	-06	6	5	896	891	6	8	9	781	9	8
cg25 6	Betaine	blue	0.46					0.02	0.33		0.19	0.10	0.27		0.59	
			085	9.86	0.32	0.008	0.27	739	199	0.00	969	793	704	0.02	126	1.72
			702	E-0	0737	64801	158	257	116	6463	242	393	885	4320	622	E-0
			5	5	841	7	819	3	2	702	4	6	3	266	6	7
cg50	o-Toluic Acid	blue	0.46	0.00	0.44	0.000	0.11	0.37	0.30	0.01	0.12	0.30	0.30	0.01	0.70	2.68

			049	01	3917	18880	144	300	585	2508	918	121	696	2175	912	E-1	
			564		7	4	539	037	641	014	966	627	790	446	154	1	
			9				2	2	2			4	4		2		
			0.45				0.13	0.27	0.24		0.10	0.41	0.17		0.66		
cg24	3-Indoleacrylic acid	blue	672	0.00	0.57		4.43E	500	978	133	0.05	119	880	302	0.16	9.04	
2			615	011	5008		-07	690	495	706	0922	582	897	777	4732	E-1	
			1	588	899			8	8	9	659	1	1	1	271	0	
			0.44	0.00				0.28	0.01	0.21		0.04	0.71	0.13		0.42	0.00
cg43	DQH	blue	527	017	0.38	0.001		867	873	463	0.08	588	450	015	0.29	0.43	0.44
6			131	947	3297	48960		735	805	981	3512	209	037	416	7591	558	0.12
			3	4	734	8		7	4	6	695	4	1	7	052	3	4
			0.44	0.00				0.36	0.15			0.32	0.30		0.71		
cg49	DL-4-Hydroxyphenyllactic acid	blue	299	019	0.42	0.000	0.11	724	103	0.22	0.12	982	730	0.01	406	1.69	
			472	541	7992	33743	278	238	088	6088	182	514	018	2077	447	E-1	
			5	9	045	3	581	4	6	884	867	2	2	523	447	1	
			0.43	0.00	0.47	5.72E	0.04	0.71	0.08	0.48	0.11	0.35	0.20	0.10	0.80	6.81	
cg23	N-Acetyl-L-phenylalanine	blue	133	029	4389	-05	631	190	683	8129	505	763	034	6756	094	E-1	

			549	941	595		771	739	546	453	125	456	885	839	629	6
			1	2			4	5	2		2	3			6	
			0.41	0.00			0.20	0.09	0.22			0.01	0.44		0.60	
cg59	Mestranol	blue	514	052	0.41	0.000	480	903	001	0.07	0.30	316	998	0.00	458	7.63
			059	825	2066	58650	223	146	591	5883	374	133	921	0150	340	E-0
			3	1	347	3	3	3	5	502	533	2	6	163	8	8
			0.41	0.00			-0.0	0.64	0.16		0.12	0.29			0.62	
cg21	N-Acetyl-D-alloisoleucine	blue	044	061	0.66	1.16E	579	411	931	0.17		0.30	0.01		662	1.82
			900	943	4680	-09	211	648	032	4134	962	956	989	1336	051	E-0
			9	7	781		32	8	5	77	729	783	31	515	8	8
			0.40	0.00				0.35	0.39		0.15	0.22	0.46		0.70	
cg26	Propionylcarnitine	blue	938	064	0.50	1.72E	0.11	476	451	0.00	0.62	734	980	6.90	736	3.15
8			730	196	2424	-05	573	279	531	1045	887	131	413	E-05	820	E-1
			9	1	292		562	9	2	955	5	2	5		4	1
cg24	4-Hydroxybenzoic acid	blue	0.38	0.00	0.32	0.008	0.11	0.37	0.20	0.10	0.13	0.29	-0.0	0.70	0.65	2.93
1			799	128	2058	36209	134	345	303	2048	186	123	481	1270	245	E-0
			162	667	515	1	105	083	224	018	407	440	104	88	340	9



cg71 8	AMK	blue	0.34	0.00			0.05	0.64			0.03	0.77	0.36		0.42	0.00	
			516	453	0.42		0.000	854	055	0.21	0.08	541	769	536	0.00	097	043
			101	523	9583		31882	289	832	163	8039	759	443	558	2556	105	200
			6	7	28			3	5	11	816	5	5	5	559	9	3
cg22 3	4-Hydroxybenzaldehyde	blue	0.33	0.00			0.17	0.15	0.14		0.05	0.66	-0.1		0.48		
			298	629	0.26	0.033		548	872	317	0.25	415	584	202	0.33	102	4.35
			725	604	2446	26609		396	803	197	1451	414	204	178	6307	284	E-0
			6	4	289	9		6	3	5	534	8	3	01	689	6	5
cg2	Terephthalic acid	blue	0.32	0.00			0.22		0.10		0.06	0.58	-0.1		0.48		
			201	837	0.13	0.272		936	0.06	258	0.41	831	575	748	0.16	506	3.67
			651	105	7143	17443		378	394	375	2423	175	279	949	0152	020	E-0
			4	6	425	7		1	853	9	328	4	5	73	883	8	5
cg23 7	D-Phenylalanine	blue	0.30	0.01			-0.1	0.22	0.14		0.04	0.73			0.68		
			784	191	0.48		3.29E	513	520	567	0.24	286	254	0.22	0.07	366	2.51
			136	949	7609		-05	146	788	326	3177	540	384	131	4127	442	E-1
			6	3	747			05	2	6	496	3	1	367	711	9	0
cg16	Hydrocortisone	blue	0.30	0.01	0.26	0.032	0.18	0.13	0.32	0.00	0.36	0.00	0.32	0.00	0.30	0.01	

3			299	340	3251	70963	738	190	767	7236	621	249	117	8552	311	336
			067	191	586	4	620	634	630	072	399	374	323	827	501	201
			9	6			2	6	3		5	2		5	9	
			0.30				0.15	0.20			0.12	0.30	0.22		0.96	
cg28	Imidazolelactic acid	blue	015	0.01	0.20	0.102	665	908	0.13	0.28	721	872	662	0.06	322	3.06
3			956	433	2925	23242	068	265	237	9335	600	362	543	7276	462	E-3
			5	861	364	7	3	6	951	884	5	2	5	374	6	8
			0.29	0.01			0.15	0.19	0.18		0.05	0.65	-0.0		0.36	0.00
cg11	Cyclohexaneacetic acid	blue	933	462	0.28	0.019	990	965	732	0.13	569	694	600	0.63	725	241
7			627	136	6081	87894	770	113	264	2039	089	468	036	2230	194	876
			3	6	038	1	5	5	7	823	4	9	54	578	2	9
			0.29	0.01			0.21	0.07	0.27		-0.0	0.64	0.18		0.34	0.00
cg85	Dl-3-Hydroxy-kynurenin	blue	866	485	0.30	0.013	743	947	242	0.02	584	135	186	0.14	947	402
1	e		031	709	3934	10165	556	290	392	6902	035	521	021	3898	086	553
			8	4	371	2	4	9	4	195	21	6	1	011	7	9
cg38	L-Lysine	blue	0.29	0.01	0.43	0.000	-0.0	0.43	0.12	0.33	0.06	0.60	0.30	0.01	0.63	1.15
9			829	498	6282	25030	969	847	029	6005	453	668	759	1992	334	E-0



			690	517	196	2	963	252	238	782	618	290	051	521	984	8
			6	4			16	1	7		5	7			3	
			0.29	0.01			-0.0	0.64	0.34		0.15	0.22	0.27		0.45	0.00
cg23	N-lactoyl-phenylalanine	blue	446	639	0.45	0.000	569	974	308	0.00	176	382	310	0.02	633	011
8			483	456	1038	14427	405	408	542	4800	180	410	518	6507	967	763
			5	4	243	4	84	2	1	463	6	4	7	95	2	3
			0.28	0.02			0.10	0.41	0.07		0.07	0.57	0.35			
cg82	Allantoin	blue	011	272	0.23	0.059	151	732	793	0.53	047	390	921	0.00	0.93	2.80
2			111	871	3447	23400	685	693	941	3920	579	584	750	3055	858	E-3
			1	6	039	9	3	5	6	742	2	2	7	588	757	1
			0.27	0.02			-0.0		0.36		0.00	0.94	0.03		0.39	
cg12	3-Hydroxyanthranilic	blue	814	373	0.34	0.004	304	816	034	0.00	938	037	391	0.78	097	0.00
1	Acid		845	824	7392	26460	616		654	2957	650	310	397	6904	334	117
				9	654	5	3	078	7	917	2	9	9	859	8	106
cg16	3-(4-benzyl-5-thioxo-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidin-2-one	blue	0.27	0.02	0.31	0.010	-0.1	0.36	0.15	0.22	0.09	0.45	0.19	0.11	0.86	1.07
6			690	439	2962	51046	134	452	198	3144	283	844	633	4119	352	E-2
			359	804	851	1	217	949	222	266	704	814	090	655	896	0

			9			81				6	9	7		6	
			0.27	0.02		-0.1	0.17	0.03		0.11	0.36	0.22		0.41	0.00
cg27				0.46					0.79				0.06		
	Thymine	blue	420	588	8.47E	672	949	303		247	858	618		496	053
3			405	230	-05	581	000	704	2290	134	832	718	7821	495	143
				575					091				659		
			7	8		49	7	5		9	6	3		4	2
			0.27	0.02		0.03	0.78	0.08		0.06	0.59	0.21		0.73	
cg18				0.28					0.47				0.08		1.35
	Glycerol-3-phosphate	blue	013	826	0.019	466	230	891		645	599	221		930	
8			380	390	55262	445	405	885	7712	650	663	163	7151	165	E-1
				387					734				586		2
			3	3		9	7	4		4	8	3		2	
			0.26	0.03			0.73	0.23		0.03	0.80	0.35		0.36	0.00
cg72	4-(3-Methyl-5-oxo-4,5-dih			0.24	0.046	0.04			0.06				0.00		
	ydro-1H-pyrazol-1-yl)ben	blue	487	161	5558	88295	232	581	076	129	303	396	3548	543	255
2	zoic acid		054	445	871	4	033	982	658	118	999	888	361	182	160
			9	2				5	8	5	3	7		6	4
			0.26	0.03		0.25	0.03	0.03		0.16	0.17	0.06		0.63	
cg46	4-[4-(aminocarbonyl)pipe			0.11	0.337				0.78				0.60		8.16
	ridino]-4-oxobut-2-enoic	blue	197	359	9893	62303	693	728	355	789	781	512	3409	827	E-0
2	acid		506	536	338	2	870	765	243	547	424	284	353	695	9
			5	9			6	4	3	4	2	8		9	

cg7	D(+)-Phenyllactic acid	blue	0.25	0.03			-0.1	0.17	0.15		0.04	0.72	0.20	0.82				
			866	598	0.31	0.010			709	003	806	0.20	411	504	436	476	1.71	
			865	310	1769	82510			121	643	261	4956	653	238	271	835	E-1	
					71	1						068				961	7	
			4	7					42	8	9		4	5	4	5		
cg67 6	Norfloxacin	blue	0.25	0.03					0.94	0.16		0.01	0.92	0.41	0.74			
			863	600	0.25	0.037	0.00				386	811	0.17	157	649	178	692	5.96
			629	715	7024	22175	883				265	302	7244	605	902	450	818	E-1
					882	1	626						828				125	3
			8	3							7	6		4	1	2	6	
cg24 6	L-Phenylalanine	blue	0.25	0.03			-0.0	0.56	0.02		0.06	0.62	0.13	0.43	0.00			
			657	756	0.41	0.000			718	661	479	0.84	068	838	658	792	023	
			911	369	3323	56201			169	958	821	3324	074	583	666	841	567	
					054	9						557				212		
			8	4			91	6	9				3	2	6	7	1	
cg69 4	3,6-bis[(1H-indol-3-yl)met hyl]piperazine-2,5-dione	blue	-0.2	0.03			0.19		-0.1		-0.1	0.34	-0.2	-0.3	0.00			
			561	787	-0.40	0.000			033	0.12	525	0.22	188	169	842	325	637	
			786	308	5297	73585			397	582	720	1332	950	025	991	293	264	
					16	4				693		197				74		
			8	8			3				2		35	6	97	07	3	
cg80	S-(Methyl)Glutathione	blue	0.24	0.04	0.31	0.010	0.03	0.80	0.13	0.27	0.09	0.44	0.27	0.02	0.76	1.26		

1			884	392	3503	37061	096	506	733	1516	630	173	227	6991	069	E-1
			057	794	148	3	254	769	008	166	995	482	130	191	173	3
			5	1			5	1	5		5	6	5		9	
			0.24	0.04			0.05	0.68	0.05		0.01	0.93	0.17		0.75	
cg65	7-(2-aminophenyl)heptan	blue	521	719	0.18	0.141	169	016	126	0.68	067	219	133	0.16	827	1.67
0	oic acid		875	833	2893	59514	681	482	601	2687	648	675	768	8959	345	E-1
			9	2	813	2	5	5	7	598	1	6	8	623	7	3
			0.24	0.04			0.08	0.48	0.07		0.06	0.58	0.10		0.96	
cg21	Dimetghyl	blue	416	818	0.15	0.200	669	885	019	0.57	901	186	770	0.38	615	2.24
0	4-Hydroxyisophthalate		585	572	9565	62684	086	682	309	5447	907	842	771	9342	674	E-3
			5	4	749	8	7	3	8	13	3	4	1	221	5	9
			0.24				-0.1	0.23	0.12		0.04	0.73	0.19		0.89	
cg22	trans-Cinnamic acid	blue	388	0.04	0.27	0.024	486	358	097	0.33	269	359	120	0.12	387	5.56
			662	845	7339	16543	479	321	826	3237	082	256	546	4071	682	E-2
			9	04	176	7	42	4	3	487	6	8	3	053	8	4
cg42	4-Ethylbenzaldehyde	blue	0.23	0.05	0.38	0.001	-0.0	0.56	-0.0	0.89	0.00	0.93	0.12	0.33	0.40	0.00
7			750	482	8789	25475	726	224	173	0161	979	780	051	5103	112	084

			845	808	88	4	254	859	288	002	232	014	559	306	758	422	
			7				4	6	19		7	3	4		5	5	
			0.22	0.06			-0.0	0.92	-0.0		0.05	0.67	0.10		0.34	0.00	
cg82	o-Cresol	blue			0.32	0.007				0.86				0.40			
4			903	433			113	819	218		272	415	341		753	424	
			889	627	846	7	075	927	638		1669	502	774	635	8619	572	775
			6	5			54	9	41		228	4	3	8	897	6	3
			0.22	0.06			-0.0	0.94	0.08				0.14	0.12		0.97	
cg22	Porphobilinogen	blue			0.21	0.084				0.51	0.18			0.30		3.96	
4			701	679			087	464	140		5827	223	304	809	5358	022	E-4
			428	550	738	3	135	087	610		885	99	882	668	9	478	1
			5	9			72	1	4				6	9	9	6	
			0.22	0.06			-0.1	0.42	0.12			0.04	0.71	0.17		0.94	
cg37	Phenylacetaldehyde	blue			0.22	0.065				0.32				0.15		9.67	
			598	807			002	298	328		4041	654	057	518	9444	881	E-3
			808	055	535	1	942	722	274		893	173	517	711	974	108	4
			2	6			4	5	6			9	5	6		3	
			0.22	0.06	0.10	0.418	0.17	0.15	0.09	0.46	0.02	0.82	0.10	0.41	0.79	1.67	
cg56	5-Hydroxytryptophan	blue															
0			449	996	1306	29596	510	964	224	1319	834	125	115	8995	459	E-1	
			250	370	872	6	304	845	736	963	588	704	543	64	102	5	

			8	4			6	4	3		5	3	2			
				0.08			0.05	0.63	0.11		0.05	0.68	0.20		0.36	0.00
cg14			0.21		0.27					0.37				0.09		
	LPC 18:1	blue	590	166	8707	0.023	977	353	102	4817	032	821	483	8978	909	229
0			492	498	356	44697	514	034	487	956	421	488	377	344	465	061
				8			3	6	5		3	1	5		6	2
			0.21	0.08							0.05	0.65	0.13		0.95	
cg68	3,4-dihydroxy-4-(4-methoxyphenyl)-1,2,3,4-tetrahydroquinolin-2-one	blue	442	382	1215	99436	770	513	874	8591	587	586	338	5660	349	4.83
0			587	839	267	9	962	102	209	898	805	430	365	674	293	E-3
			8	7							1	3	7	674	6	5
			0.20	0.09				0.41	0.07		0.14	0.23	0.07		0.56	
cg73	1-Naphthol	blue	979	090	0.17	0.168	0.10	860	909	0.52	912	207	099	0.57	308	8.58
9			181	108	1643	19006	124	322	883	7834	447	092	119	1100	056	E-0
			6	9	028	3	035	3	8	996	9	8	3	73	056	7
			0.20				0.06	0.61	0.12			0.95	0.19			
cg81	Cyclocytidine	blue	714	0.09	0.16	0.178	350	243	738	0.30	0.00	066	361	0.11	0.88	2.72
1			773	514	7622	53182	866	500	937	8059	776	052	205	9319	816	E-2
				166	03	9				355	482			183	72	3
			8				5	3	8			4	6			

cg44 1	Pyridoxamine	blue	0.20				-0.1	0.32	0.02		0.00	0.94	0.22	0.55			
			674	0.09	0.31	0.010				0.81				0.06	1.55		
			823	579	2345	67238		226	654	889	7882	867	487	607	7965	204	E-0
				562	015	3		511	612	032	221	744	003	184	75	031	6
			5					05	8	2		5	3	9		8	
cg54 6	3-Hydroxyfluorene	blue	0.20				0.08	0.47	0.08		0.08	0.47	0.06	0.70			
			602	0.09	0.14	0.232				0.47				0.61	4.54		
			943	698	9078	21655		990	280	951	4772	853	961	224	9550	335	E-1
				109	496	6		930	255	132	274	706	272	331	621	185	1
			4					5	7	7		2	1	4		3	
cg14 2	D-Proline	blue	0.20	0.09			0.02	0.82			0.08	0.51	0.13		1.26		
			443	964	0.15	0.215		738	721	0.14	0.25			0.28	0.97	E-4	
			834	589	4445	64333		649	184	131	7731	228	131	304	6879	854	
					921	1		8	9	079	198	063	324	959	901	216	5
			1	2								3	4	9			
cg79 2	Angiotensin IV	blue	0.20				0.05	0.64	0.25		-0.0	0.63	0.14	0.50			
			284	0.10	0.20	0.100		800	364	607	0.03			0.23	568	1.48	
			978	236	4180	08334		297	764	729	7951	600	175	829	4716	823	E-0
				299	327	2		9	3	4	757	881	034	232	2	823	5
			5									34	1	4		5	
cg70	Gelsemine	blue	0.19	0.10	0.19	0.119	0.03	0.75	0.04	0.74	0.02	0.82	0.12	0.31	0.85	9.10	

6			917	886	3660	22463	855	855	056	6381	707	911	475	8234	335	E-2
			664	584	676	7	761	958	833	171	989	695	969	13	025	0
			2	9			9		3		7	2	1		1	
			0.19	0.11			0.11	0.37	0.07		0.01					0.88
cg55	Sitagliptin	blue	669	344	0.09	0.468	207	028	796	0.53	753	0.88	0.15	0.22	788	2.93
4			152	329	0852	15221	500	898	461	3788	238	887	028	8407	481	E-2
			8	2	452	7	8	3	2	12	4	883	773	897	7	3
			0.19	0.11			-0.1	0.27	0.00		0.03	0.77	0.13		0.40	0.00
cg47	Indole	blue	586	500	0.36	0.002	352	904	762	0.95	653	088	202	0.29	631	071
3			345	098	7099	42963	124	659	993	1516	238	535	866	0627	537	138
			7	7	766	3	84	5	9	552	1	1	5	284	6	3
			0.19	0.11				0.83	0.05		0.02	0.83	0.11		0.95	
cg58	3-Hydroxypicolinic acid	blue	574	521	0.15	0.212	0.02	720	623	0.65	647	290	195	0.37	401	3.39
			957	648	5377	85376	578	268	543	3803	014	862	764	0793	688	E-3
			9	2	513	6	034	7	4	224	5	9	4	496	3	5
cg20	Ip7G	blue	0.19	0.12	0.31	0.009	-0.0	0.45	0.09	0.43	-0.0	0.85	0.22	0.07	0.59	1.70
2			274	100	8183	22527	940	248	728	7127	224	823	317	1671	147	E-0



			863	773	663	7	673	797	013	491	124	375	057	962	626	7
			8	7			72	9	2		38	2	7		5	
			0.19	0.12			0.02	0.83	0.10		0.04	0.71	0.13		0.97	
cg62	4-butyl-4-(hydroxymethyl				0.15					0.41				0.26		1.08
	)	blue	229	190	0636	0.227	603	563	249	2847	663	002	853	7307	343	E-4
6	e-3,5-dione		255	701	837	31646	236	326	119	442	456	342	076	335	321	2
			7	5			5	8	4		4	2	9		5	
			0.19	0.12			-0.1	0.25	0.16		0.08	0.51	0.15		0.71	
					0.18	0.129				0.17				0.20		1.32
cg16	$\delta$ -Ribono-1,4-lactone	blue	184	279	8556	46722	423	415	767	8385	221	163	811	4811	663	E-1
			608	228	242	2	663	670	768	597	758	806	252	264	065	1
			1	6			82	4	9		1	3	9		4	
			0.19	0.12			0.08	0.50	0.06		0.05	0.67	0.14		0.95	
cg60	Isoproterenol	blue	054	540	0.09	0.441	422	133	509	0.60	177	973	150	0.25	505	1.66
			157	694	6257	98561	780	406	044	3589	080	189	050	7086	499	E-3
			5	8	308	8	8	5	9	935	4	1	9	266	499	5
			5	8			8	5	9		4	1	9		5	
			0.18	0.13	0.28	0.021	0.01	0.91	0.16	0.19	0.06	0.58	0.12	0.31	0.35	0.00
cg12	O-Acetyl-L-carnitine	blue	797	067	2015	78436	288	824	044	8117	865	387	452	9140	739	321
5			380	709	172	6	007	617	776	069	291	779	801	702	688	914

			4	1			6	6	3		3		9		4	5
			0.18	0.13			-0.1	0.17	0.15		0.07	0.53	0.20		0.73	
			434	841	0.33	0.005	694	374	477	0.21	817	270	360	0.10	051	3.36
cg29	L-Tyrosine	blue	042	864	8944	37083	610	596	258	4662	075	370	896	1057	579	E-1
			8	6	583	2	98	7	8	244	4	3	1	386	7	2
			0.17	0.16				0.81	0.05				0.10		0.97	
cg13	alpha-Benzylsuccinic acid	blue	371	302	0.10	0.405	0.02	821	040	0.68	0.05	0.68	189	0.41	035	3.43
3			820	787	4112	45458	883	428	232	7755	089	486	900	5566	904	E-4
			1	9	707	8	673	2	9	805	42	776	8	668	4	1
			0.17	0.16			0.01		0.05		0.05	0.66	0.16		0.95	
cg44	Deoxycholic acid	blue	319	432	0.14	0.254	637	0.89	199	0.67	475	237	390	0.18	631	6.80
			227	500	2259	51817	517	617	799	8403	208	459	254	8502	597	E-3
			1	3	18	1	6	128	7	165	6	3	7	441	6	6
			0.16	0.17			0.01	0.92	0.07		0.04	0.69	0.10		0.97	
cg70	Citraconic acid	blue	762	852	0.10	0.412	126	846	152	0.56	957	264	802	0.38	384	6.62
			346	806	2568	49496	574	403	765	8187	092	755	423	7942	407	E-4
			2	5	119	9	9	7	6	769	3	6	6	056	1	3

cg18 3	D-2-Aminoadipic acid	blue	0.16	0.18			0.04	0.73	0.07		0.03	0.78	0.09	0.96				
			611	251	0.09	0.435			193	814	834	0.53	394	673	902	638	1.82	
			934	283	7580	70488			325	906	923	1765	183	395	115	8927	128	E-3
			4	8	853	4			5	8	4	679	5	6	3	569	5	9
cg41 3	5-Methyl-2'-deoxycytidine	blue	0.16	0.18			0.05	0.65	0.05		0.03		0.09	0.95				
			600	281	0.07	0.547			556	770	878	0.63	786	0.76	714	662	5.42	
			539	731	5426	22806			011	006	396	9180	688	275	714	7758	975	E-3
			7	4	59	3			1	1	1	919	6	688	9	935	5	6
cg54 9	Phenylacetyl glycine	blue	0.16	0.19			0.04		0.06		0.03	0.75	0.10	0.95	6.03			
			084	698	0.07	0.546			277	0.73		0.63	988	053	065	0.42	0.95	6.03
			834	464	5529	67829			591	308	220	0136	091	791	562	1309	956	E-3
			4	9	811	4			1	138	2	621	4	7	5	581	285	7
cg21 6	Miquelianin	blue	0.15	0.20			0.01	0.91			0.03	0.78	0.19	0.95				
			729	719	0.09	0.455			385	206	0.06	0.61	473	186	042	0.12	495	1.78
			448	383	3356	92447			827	100	365	1635	591	639	159	5649	304	E-3
			2	2	914	9			2	4		124	453	3	3	3	544	304
cg10	3-Coumaric acid	blue	0.15	0.21	0.11	0.345	-0.0	0.67	0.14	0.23	0.03	0.75	0.09	0.45	0.96	2.73		

			403	688	8029	24242	531	196	963	0471	878	717	254	9881	594	E-3
			278	860	211	3	007	746	090	237	502	921	257	029	416	9
			9	9			85	6	6		8	8	5			
			0.15	0.22			0.01	0.88	0.05		0.04	0.74	0.10		0.96	
cg51	3-Nitro-L-Tyrosine	blue	189	340	0.08	0.472	777	734	938	0.63	153	054	705	0.39	463	8.95
3			87	170	9875	96963	605	444	300	5763	506	765	964	2218	464	E-3
				3	513	2	2	1	8	377	4	2	1	338	3	9
			0.15	0.22			0.03		0.06		0.03	0.77	0.10		0.96	
cg52	VPH	blue	146	473	0.07	0.540	120	0.80	249	0.61	582	521	008	0.42	043	3.05
1			585	921	6604	97278	629	356	534	8130	314	536	924	3940	091	E-3
			1	6	018	3	5	364	2	55	8	7	1	583	4	7
			0.14				0.03	0.80			0.03	0.75	0.10		0.96	
cg92	5-Methyldeoxycytidine	blue	948	0.23	0.07	0.571	053	767	0.05	0.68	921	458	199	0.41	109	1.80
			948	091	0851	86306	989	729	139	1931	264	567	888	5107	062	E-3
			6	718	008	6	8	2	502	788	1	9	1	344	4	7
cg63	1-Nitrosopiperidine	blue	0.14	0.23	0.08	0.519	0.02	0.84	0.04	0.72	0.05	0.66	0.09	0.46	0.95	5.98
7	(NPIP)		708	857	0700	48649	415	732	419	4545	436	463	244	0365	957	E-3

			951	646	237	9	688	724	947	984	289	069	313	444	330	7
				2			1	5	6		9	7	6		3	
			0.14	0.24			0.02	0.84			0.03	0.77	0.10			
cg60	Quinidine	blue	534	426	0.07	0.546	444	554	0.06	0.61	607	365	465	0.40	0.95	1.53
1			125	488			191	780	236	8842	937	026	064	3019	834	E-3
					84	9			89	826				173	478	6
			2	1			8	7			4	1	6			
			0.14	0.26			0.02	0.86	0.04		0.04	0.74	0.09		0.95	
cg22	Oxaceprol	blue	048	056	0.06	0.599	154	366	901	0.69	101	370	725	0.43	999	4.29
9			191	173			608	028	936	5899	113	739	269	7257	939	E-3
					346	6				678				425	9	7
			2	4			5	2	8		6	5	3		9	
	methyl		0.13	0.26			0.01	0.92	0.05			0.73	0.10		0.96	
cg16	5-[[2-(ethoxycarbonyl)-3-o	blue	777	995	0.07	0.561	126	844	019	0.68	0.04	670	002	0.42	254	5.45
1	xohex-1-enyl]amino)-2-fu		533	025			854	635	185	8992	217	442	155	4255	323	E-3
	roate				781	9				97	328			631	9	8
			7	9			1	1	6			6	4		9	
			0.13	0.27	0.07	0.573	0.01	0.91	0.04	0.72	0.04	0.73	0.09	0.46	0.96	4.16
cg14	3-Nitrotyrosine	blue	686	314	0640	00791	279	881	394	6052	227	610	097	7543	003	E-3
5			972	157	646	8	022	456	777	767	248	762	619	931	857	7

			8	3			4	6		2	5	3		5		
cg59	Chalcone	blue	0.13	0.28			0.01	0.92	0.04		0.03	0.76	0.10		0.95	
9			460	123	0.06	0.603	166	596	860	0.69	817	091	218	0.41	832	1.55
			389	623	5176	10801	070	303	235	8362	020	290	032	4273	686	E-3
			1	922	5		6	6	2	153	2	6	2	635	9	6
cg62	6-styryl-3-phenyl-2,5-dihydro-1,2,4-triazin-5-one	blue	0.13	0.28				0.78	0.05		0.05	0.68	0.10			
8			455	142	0.06	0.620	0.03	412	013	0.68	151	124	239	0.41	0.93	2.73
			209	311	2150	07229	436	355	556	9323	147	974	034	3309	391	E-3
			3	4	791	4	752	3	8	971	7	8	9	778	345	0
cg10	7-Ketolithocholic acid	blue	0.13	0.28			0.00	0.93	0.04			0.74	0.09		0.95	
2			369	451	0.06	0.591	953	944	708	0.70	0.04	404	517	0.44	969	5.45
			737	881	7257	56528	214	966	929	7322	095	414	426	7162	331	E-3
			1	7	29	4	2	6	5	637	534	1	5	494	8	7
cg66	2-Aminobenzenesulfonamide	blue	0.13	0.29			0.01	0.88	0.04		0.04	0.73	0.09		0.95	
1			129	333	0.06	0.630	829	406	380	0.72	197	790	337	0.45	504	1.67
			535	867	0243	86791	674	701	777	6891	406	335	868	5818	067	E-3
			6	4	433	6	3	4	2	278	9	5	9	94	3	5

cg36 2	SM (d28:2/16:1)	blue	0.12	0.31				0.92	0.03		0.03	0.77	0.08	0.95				
			515	669	0.04	0.701	0.01		875	938	0.75	552	703	700	271	8.13		
			403	479	8075	47555	122		371	037	3569	462	997	541	7275	109	E-3	
					854	2	001				073				24	5	5	
			4	7					7	7		4	1	7		5		
cg72 4	methyl 4-benzoyl-N-cyanotetrahydro pyridine-1(2H)-carbi midothioate	blue	0.12	0.31				-0.0	0.67	0.11		0.77		0.51				
			497	739	0.17	0.153			518	922	222	0.36	0.03	0.08	0.47	9.75		
			399	700	7573	74759			581	070	820	9631	509	967	899	7322	E-0	
					983	4			581	070	820	079	436	189	743	201	142	6
			2	7					9	4	2			3	743	201	8	8
cg20 4	geranyl pp	blue	0.12					0.00	0.97	0.05		0.03	0.77	0.07	0.96			
			459	0.31	0.05	0.658			402	439	896	0.63	581	528	493	0.54	4.11	
			150	889	5338	97821			707	935	337	8156	237	119	145	9868	005	E-3
			9	209	951	1			8	1	9	559	4	7	2	966	558	7
									8	1	9		4	7	2	966	3	3
cg11 6	Nicotinamide N-oxide	blue	0.11	0.34				-0.0	0.88	0.06		0.03	0.80	0.15				
			915	061	0.08	0.494			182	438	166	0.62	044	826	109	0.22	0.95	2.01
			771	709	5566	53223			466	230	483	2815	526	186	738	5882	477	E-3
					5	2			4	2	7	329	7	9	9	164	722	5
			7	6					4	2	7		7	9	9			
cg12	Mycophenolic acid	blue	-0.1	0.34	-0.00	0.984	-0.4	2.44	-0.0	0.85	-0.0	0.73	0.01	0.92	0.30	0.01		

4			191	077	2485	19604	944	E-0	223	8492	421	701	137	7798	735	206
			195	309	764	4	769	5	711	149	214	601	078	877	134	250
			02	1			76		62		97	9		9	5	
				0.43			-0.0	0.90	0.04		0.02	0.81	0.09		0.95	
cg55	AL 8810 Methyl ester	blue	0.09	212	0.04	0.727			0.73		0.02	0.81	0.09	0.45	0.95	3.10
0			834	340	3731	35068	145	742	202	7600	870	901	285	8364	064	E-3
			039	3	093	2	913	931	435	648	778	334	418	835	294	4
							18	2	7		6	8	3		7	
							-0.3	0.00	0.08		-0.0	0.93	0.51		0.48	
cg28	L-(+)-Citrulline	blue	0.08	0.51	0.34	0.003				0.49						3.91
1			181	373	9882	97960	905	118	525	6125	101	536	960	7.79	352	E-0
			066	691	662	3	584	656	207	49	761	706	884	E-06	142	5
							43	5	1		8	1	4		2	
							-0.4	0.00	0.14		0.03	0.79	0.12		0.38	0.00
cg74	N1-isopropyl-2-(1H-2-pyr	blue	0.07	0.55	0.30	0.012				0.23				0.31	0.38	0.00
	rolylcarbonyl)-1-hydrazin		359	704	7124	12934	143	054	753	7138	189	931	475	8270	923	123
	ecarboxamide		120	8	041	7	377	293	588	813	538	547	026	971	206	738
			4				01	4	5		6	9	9		2	2
cg85	Asp-Phe	blue	0.07	0.56	0.02	0.852	-0.0	0.75	0.02	0.81	0.04	0.73	0.09	0.42	0.93	7.06
0			256	259	3255	95713	399	032	879	8491	246	496	897	9125	673	E-3



			090	692	859	3	161	445	205	11	290	244	901	017	117	1	
			5	8			87	4	5		9	5			9		
			0.06				-0.2				-0.0	0.79	0.15		0.55		
cg15	8,8'-dicarboxy-1,1'-binaph		964	0.57	0.12	0.325	622	0.03	0.13	0.28	319	871	535	0.21	772	1.15	
6	thalene	blue	299	845	2833	82131	519	340	341	5538	925	716	035	2934	930	E-0	
			1	185	606	9	3	158	707	917	13	1	3	731	1	6	
			0.06	0.60			-0.0		0.08		0.01	0.90	-0.1				
cg19	N'2-(2-furylcarbonyl)-3-c		537	199	0.03	0.765	655	0.60	383	0.50	486	569	321	0.29	0.67	4.96	
8	hloro-4-methylthiophene-	blue	744	112	7440	35109	507	102	299	3349	605	417	414	0211	538	E-1	
	2-carbohydrazide		7	1	529	4	87	638	9	269	8	1	07	887	793	0	
			0.06	0.60			-0.0	0.71	0.10		-0.0	0.88	-0.1			0.00	
cg19	LysoPE 18:0	blue	478	531	0.07	0.527	454	736	117	0.41	182	435	718	0.16	0.43	022	
0			192	073	9247	05857	011	708	024	8927	506	725	701	7619	869	911	
			7	4	234		16	4	5	172	2	1	87	213	635	8	
cg45	Sildenafil-d3	blue	755	0.64	0.24	0.048	-0.2	0.08	0.04	0.73	-0.0	0.91	0.06	0.59	0.54	2.27	
3			636	620	3745	58428	159	163	281	2855	135	418	685	3780	467	E-0	
				636	767	858	6	227	915	354	34	224	393	664	523	915	6

			4	7			7	1	1		37	8	3		7	
cg66	(6E)-7-(2H-1,3-benzodiox		0.05	0.65			-0.2	0.01	-0.0		0.01		0.28		0.85	
9	ol-5-yl)-1-(piperidin-1-yl)	blue	547	818	0.18	0.145	967	554	365	0.77	486	572	223	0.02	0.42	1.63
	hept-6-en-1-one		695	055	1085	64334	273	931	185	0969	074	772	141	1679	347	E-1
			2	2	067	9	29	6	6	661	5	772	5	257	5	9
			0.01	0.87			-0.0	0.68			-0.0	0.94	0.04		0.91	
cg81	PC (18:2/19:2)	blue	944	687	-0.06	0.619	512	293	0.00	0.98	080	857	140	0.74	108	2.54
4			015	683	2319	11893	231	866	275	2489	938	275	679	1320	615	E-2
			2	1	902	5	77	2	422	51	2	4	2	853	2	6
			0.01	0.87			-0.0	0.64	0.07		-0.0	0.94	-0.2		0.36	0.00
cg21	LPC 22:6	blue	909	906	0.00	0.942	577	535	599	0.54	085	552	138	0.08	446	262
1			178	645	9048	51516	044	845	842	4185	739	674	471	4687	846	451
			8	1	717		37	3	6	729	21	7	78	097	9	5
			0.01	0.90			-0.2	0.08	-0.0		-0.0		-0.0		0.55	
cg80	TQH	blue	531	288	0.05	0.648	132	551	871	0.48	401	903	451	0.71	164	1.58
8			171	050	7120	71192	968	007	353	6622	286	903	772	8702	735	E-0
			9	7	171	1	87	2	52	709	09	931	98	404	6	6

cg14 9	DL-Citrulline	blue	-0.0	0.93			-0.1	0.23	-0.0		-0.0	0.77	-0.0		0.45	0.00			
			103	425	-0.04	0.696			486	345	630	0.61	359	420	286	0.81	345	013	
			516	518	8949	31155			888	319	480	5020	891	101	196	9559	223	152	
					581	1						884				39			
			26	2					29	4	99		92	6	9		1	2	
cg34 3	RPH	blue	0.00	0.98			-0.1	0.14			-0.0	0.78	0.09		0.72				
			264	317	0.02	0.852			823	279	-0.0	0.95	349	072	517	0.44	209	7.79	
			622	600	3338	43988			521	841	063	9738	222	521	987	7135	298	E-1	
					592	3					348	822				611		2	
			6	3					87	4			77	4	1		2		
cg34 8	Styrene	bro wn	0.61				0.59		0.20		0.29	0.01	0.60		0.07	0.53			
			325	4.40	0.46		8.80E	396	1.46	169	0.10	011	813	019	1.00	813	287		
			303	E-0	3723		-05	718	E-0	417	4375	570	042	461	E-07	737	923		
				8	859				7		48								
			3					2		1		1	9	2		2	2		
cg66 7	N-Acetylputrescine	bro wn	0.57				0.24	0.04	0.18		0.31	0.01	0.59		0.22	0.07			
			956	3.41	0.73		2.32E	299	930	958	0.12	295	051	331	1.52	412	043		
			756	E-0	4147		-12	180	663	162	7357	431	268	977	E-07	902	013		
				7	198						903								
			3					5	6	7		7	3	4		2	2		
cg41	QNK	bro	0.55	1.52	0.59	1.63E	0.32	0.00	0.10	0.40	0.36	0.00	0.37	0.00	0.17	0.15			

8		wn	238	E-0	2174	-07	228	831	368	7387	269	276	112	2156	508	968	
			449	6	643		572	374	700	949	554	357	386	54	838	395	
			1				2	3	5		7	2	1		8		
			0.55				0.36					0.00	0.33			0.06	0.62
cg23	Taurochenodeoxycholic	bro	114	1.62	0.39	0.001	932	0.00	0.21	0.08	0.39			0.00		121	536
6	acid	wn	517	E-0	5252	02148	525	227	167	7979	795	618	868	5462		331	861
			3	6	683	1	2	501	068	031	363			05		2	4
			0.53				0.49		0.25			0.25				0.23	0.05
cg79	3-Phosphoglyceric acid	bro	820	3.15	0.40	0.000	601	2.28		0.03	0.14		0.49		2.27	359	906
6		wn	308	E-0	8389	66380	178	E-0		8824	097	912	614	E-05		600	748
			4	6	545	4	9	5	3	812	976	6	359			6	7
			0.51				0.19	0.12	0.18		0.14	0.23	0.87			0.19	0.10
cg41	N-Methylisoleucine	bro	261	1.08	0.64		312	027	925	0.12		878	313	222	1.50	897	923
0		wn	413	E-0	2037	6.25E	019	887	135	8034		923	411	301	E-21	264	613
			3	5	612	-09	3	7	3	44		6	1	8		8	7
cg35	Methylimidazoleacetic	bro	0.51	1.08	0.60	7.87E	0.26	0.03	0.24	0.04	0.17	0.14	0.74	4.83	0.14	0.25	
2	acid	wn	258	E-0	4082	-08	227	338	401	8330	994	824	884	E-13	113	834	

			816	5	722		033	872	300	46	131	749	273		174	086	
			1				7	9	7		5		1		1	2	
			0.50				0.23	0.05	0.28			0.01	0.73		0.06	0.61	
cg70	N-Acetyl-L-histidine	bro	767	1.36	0.57		3.81E	427	831	325	0.02	0.28					
8		wn	373	E-0	7648		-07	348	494	510	1187	630	977	985	1.28	384	056
			2	5	492			9	6	6	496	453	845	364	E-12	246	379
			0.48				0.22	0.06	0.33			0.47		0.63		0.14	0.26
cg95	(+/-)12(13)-DiHOME	bro	538	3.62	0.57		4.60E	673	713	361	0.00	5.89			0.14	0.26	
		wn	209	E-0	4324		-07	603	931	911	6191	367	522	1.01	029	121	
			3	5	256			9	5	6	684	976	002	E-08	271	075	
			0.47				0.31	0.01	0.19			0.26	0.03	0.68		0.17	0.15
cg54	Phosphoethanolamine	bro	896	4.73	0.50		1.89E	130	095	331	0.11	128	408	955	1.53	570	819
8		wn	823	E-0	0260		-05	154	077	699	9894	127	510	692	E-10	363	902
			9	5	992			3	5	1	19	5	9	8		8	3
cg80	6-phospho-D-glucono-1,5-lactone	bro	0.45	0.00	0.46		6.92E	0.23	0.05	0.14	0.25	0.40	0.00	0.31	0.01	0.06	0.62
6		wn	642	011	9739		-05	308	964	295	2191	965	063	454	0106	101	649
			519	724	976			005	586	098	644	465	622	078	565	433	518

			4	3			7	1	8		5		1		5	4
			0.44	0.00			0.13	0.26	0.18		0.13	0.27	0.89		0.10	0.40
cg76	Cyclohexylsulfamate	bro	403	018	0.58	2.30E	805	897	027	0.14	709	234	766	1.84	407	562
6		wn	130	800	6371	-07	407	305	371	7487	374	982	907	E-24	532	416
				8	4	798		3	5	4	118	2	4	9		1
			0.44	0.00			0.14	0.23	0.16		0.14	0.25	0.79		0.10	0.42
cg29	N-Acetylserotonin	bro	100	021	0.58	2.13E	723	812	987	0.17	220	469	836	9.85	016	359
4		wn	587	040	7709	-07	039	207	235	2688	670	524	690	E-16	256	946
				4	2	785		1	6	6	66	1	9	7		1
			0.42	0.00			0.33	0.00	0.27		0.15	0.21	0.34		0.04	0.69
cg56	allantoate	bro	827	033	0.35	0.003	453	604	889	0.02	591	125	192	0.00	833	996
8		wn	820	401	0790	88000	996	231	966	3347	382	942	274	4954	187	099
				1	5	172	8	4	7	3	45	1	8	4	944	3
			0.42	0.00			0.34	0.00	0.24		0.10	0.38	0.30		0.05	0.63
cg51	3-Methylcrotonylglycine	bro	336	039	0.33	0.006	174	497	627	0.04	813	744	240	0.01	877	922
7		wn	420	735	0568	70995	105	947	812	6221	600	835	628	3590	704	044
				7	1	465	9	8	6	5	709	6	2	9	819	1

cg37 7	5,6-dihydroxyindole	bro	0.41	0.00	0.34	0.004	0.32	0.00	0.25	0.03	0.02	0.81	0.36	0.00	0.17	0.14		
			335	056			602	755	385		866	929		943	942			
			413	142			421	7717	382		9711	684		2447	016	246		
			5	6			6	478	254		45	897		634	2	6		
cg61 8	Lysope 16:0	bro	0.39	0.00	0.35	0.003	0.28	0.02	0.18	0.13	0.00	0.50	1.65	0.03	0.76	0.76		
			200	113			412	077	789		586	328		766	398			
			190	340			949	4704	856		0834	564		767	051	E-05	435	889
			5	8			1	539	2		012	234		9	4	2	8	
cg71	Corchorifatty acid F	bro	0.39	0.00	0.48	3.04E	0.17	0.14	0.21	0.07	0.39	0.00	0.31	0.01	0.12	0.30		
			085	117			949	928	999		000	120	195		742	794		
			007	564			148	9463	704		5909	022	771		176	0776	048	026
			1	8			3	907	4		277	8	8		6	569	7	
cg64 3	EPK	bro	0.38	0.00	0.50	1.83E	0.04	0.73	0.10	0.41	0.09	0.43	0.48	3.42	0.18	0.13		
			884	125			225	623	280		688	899	665		413	886		
			228	268			126	1015	989		1388	527	936		686	E-05	738	123
			9	3			1	812	8		275	9	5		6	4	1	
cg65	N-cyclooctylurea	bro	0.38	0.00	0.39	0.000	0.23	0.05	0.20	0.09	0.12	0.31	0.38	0.00	0.08	0.51		

3		wn	535	139	9956	87716	714	521	897	2187	627	234	125	1586	157	497
			168	750	355	3	457	161	987	186	502	504	234	712	175	117
			4	8			3	8	4		9	2	7		7	6
			0.37	0.00			0.19	0.11	0.14		0.26		0.38		0.37	0.00
cg53	3-Methyladenine	bro	900	169	0.41	0.000	507	649	488	0.24	194	0.03	699	0.00	443	195
8		wn	415	997	9346	45707	779	404	627	5760	763	361	882	1327	390	285
			6	5	27	6	2	7	5	391	5	462	8	389	5	9
			0.37	0.00			0.01		0.14		0.13	0.26	0.72		0.13	0.28
cg82	Adenine	bro	564	188	0.51	9.03E	797	609	206	0.25	888	606	093	8.72	321	628
1		wn	071	300	6480	-06	471	609	642	5168	646	896	481	E-12	254	475
			9	1	492		9	373	6	984	1	3	6		7	7
			0.36	0.00			0.01	0.88	0.12		0.13	0.26			0.14	0.24
cg25	Adenosine	bro	903	229	0.51	8.31E	754	877	226	0.32	873	658	0.72	6.96	620	144
4		wn	716	451	8239	-06	964	014	644	8077	714	835	324	E-12	447	463
			9	7	637		1	7	8	157	4	4	082		8	4
cg23	Arachidonic acid	bro	0.36	0.00	0.63	1.42E	0.01	0.90	0.13	0.28	0.09	0.45	0.80	2.88	0.18	0.14
3		wn	811	235	0311	-08	431	918	288	7468	391	320	680	E-16	308	116



			076	826	365		345	460	878	066	836	756	706		762	642
			4	3			6	8	2		1	1			2	9
			0.36	0.00			0.22	0.07	0.15		0.15	0.20	0.34		0.32	
cg51	Phosphocholine	bro	331	271	0.39	0.001	441	006	927	0.20	681	861	171	0.00	706	0.00
8		wn	482	427	0120	20312	422	394	291	1465	112	080	265	4983	416	735
				3	1	685	5	5	7	9	086	5	4	5	321	2
			0.34	0.00			0.24	0.05	0.07		0.42	0.00	0.53		0.06	0.60
cg54	Glycoursodeoxycholic acid	bro	025	518	0.30	0.011	003	222	185	0.56	316	040	508	3.68	510	353
		wn	702	390	7957	88570	902	042	750	6400	456	014	711	E-06	070	277
				2	7	867	9	3	7	3	172	2	2	8	5	2
			0.32	0.00			0.12	0.30	0.33		0.17	0.16	0.75		0.04	0.72
cg67	1-(4-methyl-2-pyridyl)pyrrolidine-2,5-dione	bro	583	759	0.35	0.003	857	354	664	0.00	445	121	618	2.12	373	734
7		wn	227	008	3936	55162	323	814	255	5713	915	325	542	E-13	255	192
				4	2	379	1	8	9	6	085	1	1	8	5	2
cg83	PC (9:0/9:0)	bro	-0.3	0.00	-0.17	0.165	-0.3	0.00	-0.1	0.18	-0.1	0.26	0.36	0.00	0.05	0.64
2		wn	238	798	2529	96963	727	205	656	3735	386	691	857	2326	741	700
				414	919	814	3	609	354	625	731	439	285	419	179	736

			54	9			11	4	19		55	1	3		6	7
			0.31	0.01			0.22	0.07	0.10		0.21	0.07	0.32		-0.0	0.99
cg36	D-Raffinose	bro	315	046	0.24	0.046	323	159	020	0.42	933	681	103	0.00	001	927
0		wn	412	076	6483	03449	093	324	753	3390	509	777	119	8583	137	658
			3	7	296	6	4	6	5	299	3	6	4	779	77	7
			0.30	0.01			0.03	0.75	0.40			0.63	0.85		0.07	0.56
cg31	Uridine monophosphate (UMP)	bro	502	276	0.41	0.000	847	906	244	0.00	0.05	969	210	1.17	264	216
		wn	268	260	4730	53571	512	052	903	0808	869	439	131	E-19	111	400
			1	1	146	1	1	3	9	41	407	1	7		5	4
			0.29	0.01			0.00	0.98	0.13		0.08	0.48	0.74		0.45	
cg11	LPC 18:2	bro	641	566	0.44	0.000	235	504	832	0.26	656	947	110	1.12	212	0.00
9		wn	873	235	1122	20949	238	391	257	8033	744	813	533	E-12	289	013
			873	5	481	5	9	1	5	973	5	6	8		7	841
			0.27	0.02			0.23	0.06	0.06		0.28	0.01	0.39		0.01	0.92
cg65	Rifampicin	bro	455	568	0.20	0.100	199	087	738	0.59	964	832	670	0.00	127	840
		wn	263	646	3750	81596	441	783	776	0844	256	841	298	0974	516	439
			8	6	177	4	7	3	7	66	6	7	6	848	6	5

cg20 3	LPE 12:0	bro	0.26	0.02	0.36	0.002	-0.0	0.87	0.09	0.43	0.05	0.68	0.83	1.36	0.39	0.00				
			935	874			204	082			024	870	927		279	110				
			473	015			7827	37806			807	3368	151		100	678	E-18	351	517	
			9	6			557	5			14	4	595		438	4	8	3	6	8
cg79 1	Taurocholic acid sodium salt hydrate	bro	0.25	0.04	0.45	0.000	-0.0	0.78	0.11	0.35	0.03	0.79	0.58	3.27	0.14	0.25				
			130	180			345	313	490		260	492	032		332	092				
			794	877			2877	13446	294		106	331	8257		776	985	765	E-07	990	352
			2	2			634	69	7		3	221	1		8	4	2	3		
cg80 4	L-Tryptophan	bro	0.25	0.04	0.39	0.000	-0.0	0.61	0.09	0.47	0.12	0.69	0.30	0.41	0.00					
			114	194			637	101	025		805	827		7.15	606	051				
			958	219			7433	95209	612		896	879		1076	307	552	760	E-11	851	173
			6	5			677	27	8		1	468		5	497	3	4	3		
cg67	11,12-Epoxy-(5Z,8Z,11Z)-i cosatrienoic acid	bro	0.24	0.04	0.39	0.000	-0.0	0.80	0.14	0.25	0.11	0.57	0.37	0.01	0.88					
			373	859			306	730	139		141	959		3.41	889	033				
			641	328			8082	93228	002		477	461		7446	254	314	458	E-07	025	361
			1	1			572	3	1		4	4		113	8	214	4	2	1	
cg19	P-Coumaroyl Agmatine	bro	0.23	0.05	0.34	0.003	-0.0	0.92	0.16	0.17	0.17	0.16	0.84	3.25	0.17	0.15				

6		wn	698	538	9849	98325	116	605	843	6401	207	709	690	E-19	677	563
			055	520	736	9	463	418	600	925	786	857	505		726	227
			5	7			09	6	2			9	3		9	4
			0.23	0.05			0.13	0.26	0.05		0.13	0.27	0.65		0.11	0.36
cg48	Linustatin	bro	354	912	0.26	0.030	897	577	385	0.66	720	194	630	2.20	277	727
3		wn	214	765	6797	35109	077	597	322	7589	949	130	464	E-09	822	480
			1	6	515	8	8	2	7	733	6	8	1		8	2
			0.22	0.06			0.14	0.25	0.07		0.09	0.44	0.84		-0.0	0.93
cg29	Indirubin	bro	511	916	0.22	0.073	152	700	075	0.57	623	207	246	7.55	097	830
1		wn	703	808	1951	27689	478	380	834	2367	915	210	326	E-19	125	615
			7	8	369	9	9	7	6	232	6	7	9		08	2
			0.21	0.07			0.52				0.00	0.95	0.38		0.04	0.71
cg66	Solanidine	bro	732	962	0.17	0.148	0.07	722	0.05	0.65	710	485	791	0.00	598	391
8		wn	521	937	9664	88221	921	544	516	9974	391	545	609	1289	043	473
				3	815	6	533	6	665	666	9	8	5	73	3	9
cg88	18-β-Glycyrrhetic acid	bro	0.20	0.09	0.30	0.013	-0.0	0.97	0.13	0.26	0.07	0.53	0.85	1.64	0.12	0.33
		wn	919	185	1414	91667	042	314	821	8395	685	962	041	E-19	093	340



				2				9	6		6	9	4		8	3	
				0.18	0.13			-0.0	0.65	0.12		0.03	0.77	0.90		0.16	0.18
cg51	Fluprostenol	serinol	bro	455	795	0.31	0.009	553	885	428	0.32	662	029	504	1.89	663	113
6	amide		wn	385	457	7615	35817	609	127	587	0090	857	857	062	E-25	583	733
				4	7	437	1	07	9	3	017	8	8	6		5	6
				0.18	0.14			0.01	0.91	0.08			0.68	0.93		0.04	0.74
cg53	L-Tyrosinemethylester		bro	272	197	0.26	0.031	274	907	897	0.47	0.05	786	016	1.50	052	665
1			wn	207	585	4628	77636	876	685	826	7417	038	116	820	E-29	301	497
				9		27	6	3	2	5	438	44	5	1		6	8
				-0.1	0.14			-0.2	0.02	-0.0		-0.1	0.34	0.64		-0.0	0.56
cg57	Palmitoylcarnitine		bro	805	682	-0.08	0.522	775	403	391	0.75	170	943	091	6.77	719	566
4			wn	645	424	0123	48349	923	112	695	4846	132	981	690	E-09	928	724
				35	6	883	4	01	7	48	923	31	8	5		83	8
				0.18	0.14			-0.0		0.20		-0.0	0.73	0.36			0.00
cg80	N-butyl-2-methyl-5-(pipe		bro	040	719	0.29	0.015	821	0.51	659	0.09	419	784	914	0.00	0.32	786
9	ridinosulfonyl)-3-furamid		wn	019	856	5558	98100	293	209	517	6047	833	753	113	2287	446	174
	e			1	3	97	9	88	258	9	091	42	3	1	46	756	5

cg41 6	PC (18:4e/2:0)	bro	0.17	0.15	0.33	0.006	-0.0	0.52	0.10	0.41	0.00	0.93	0.80	0.07	0.55				
			712	479			787	951	158		967	855	960			1.89	467	122	
			957	676			776	742	789		298	673	133			E-16	835	126	
			248	4			51	3	2		397	2	5			1	4	5	
cg83 5	LPE 20:4	bro	0.17	0.15	0.32	0.007	-0.0	0.73	0.08	0.47	0.05	0.65	0.95	0.11	0.34				
			561	840			428	255	917		604	492				8.30	825	432	
			841	410			637	398	062		074	571				E-36	296	225	
			818	3			14	3	4		005	2				9	579	3	2
cg21 5	Anacardic acid	bro	0.17	0.16	0.15	0.220	0.02	0.85	0.05	0.63	-0.0	0.91	0.35	0.00	0.11	0.36			
			225	665			330	262	951		139	126	342				3602	319	550
			511	514			960	108	280		835	941	917				832	164	978
			759	7			8	2	9		862	21	5				6	3	7
cg18 9	Lysope 18:1	bro	0.16	0.17	0.26	0.028	-0.0	0.72	0.12	0.31	0.05	0.67	0.91	0.31	0.00				
			997	242			447	116	626		179	959	300			1.30	504	998	
			325	998			642	864	453		403	596	974			E-26	251	099	
			9355	73940			956	7	91		7	2	593			8	7	1	7
cg17	2-(3,4-dimethoxyphenyl)-	bro	0.16	0.17	0.20	0.101	-0.0	0.85	0.14	0.25	0.04	0.71	0.53	4.30	0.38	0.00			

1	N-(4-morpholinophenyl)acetamide	wn	925	427	3540	17439	229	510	332	0928	647	099	194	E-06	190	155
			779	038	615	3	123	541	828	94	165	188	692		966	490
			1	9			54		1			5	6		3	3
			0.15				-0.0	0.98				0.03	0.76	0.92		0.04
cg69	Isorhamnetin	bro	724	0.20	0.24	0.050			0.11	0.35		0.03	0.76	0.92		0.04
6		wn	200	734	1734	53041	017	857	673	0584	711	734	503	1.34	672	948
			1	735	716	6	970	451	747	526	361	199	504	E-28	490	659
			0.15	0.21			0.03	0.77	0.16		0.04	0.74	0.74		-0.0	0.92
cg13	3,14-dihydro-15-keto-tetranor Prostaglandin E2	bro	630	010	0.18	0.136	650	108	831	0.17	114	291	080	1.15	121	270
4		wn	460	301	5308	32274	038	055	864	6707	283	271	461	E-12	757	249
			8	6	653	7	2	9	7	86	9	1	5		79	2
			0.15	0.21			-0.3	0.01	0.05		0.06	0.59	0.48		0.22	0.07
cg22	(R)-3-Hydroxy myristic acid	bro	491	422	0.39	0.000	149	000	578	0.65	673	445	836	3.18	439	008
5		wn	887	392	8920	90724	413	621	288	6413	493	421	662	E-05	865	389
			2	6	865	8	21	4	2	589	2	3	2		6	8
cg79	5-Methylcytidine	bro	0.15	0.21	0.19	0.125	0.05	0.63	0.06	0.60	0.04	0.74	0.89	1.47	0.01	0.90
7		wn	475	471	0547	39476	945	534	410	9085	009	922	041	E-23	523	334





			1	6			56	7	5		6	8		1	5		
			0.13	0.26			-0.1	0.15	0.13		0.17	0.15	0.56		0.45		
cg58	2,6-Dihydroxypurine	bro	807	891	0.39	0.001	758	786	495	0.27	675	569	634	7.18	764		
0		wn	115	324	5139	0252	418	683	631	9966	122	416	418	E-07	300	908	
											859				148		
				6	1			58	3	8		5	9	4		7	
			0.13				-0.0	0.76	0.12		0.03	0.78		0.06	0.61		
cg75	Estriol	bro	037	0.29	0.22	0.068	374	531	596	0.31	479	152		2.24	372	121	
2		wn	779	675	5697	43483	472	002	298	3551	211	222		E-28	639	419	
				6	46	734	5	75	6	5	976	1	3	733		2	2
				-0.1	0.32			-0.2	0.05	-0.0		-0.0	0.67	0.65		0.41	0.00
cg76	PE (9:0/9:0)	bro	236	277	-0.02	0.831	404	178	337	0.78	531	160	340	2.73	215	058	
7		wn	023	928	6756	12988	678	874	747	7759	635	191	585	E-09	613	472	
				9	4	114	9	4	8	26	351	43	8	7		2	2
				0.10	0.39			-0.0	0.49	0.10			0.55			-0.0	0.95
cg26	Uracil	bro	744	049	0.24	0.044	857	336	901	0.38	0.07		0.74		067	724	
6		wn	754	532	8717	03631	965	847	436	3581	329	865		5.47	268	950	
											573	259	357		E-13		
				3	9	057	3	01	8	1			8	896		31	4

cg84 9	LPE 20:5	bro	0.09	0.42			-0.0	0.43	0.07		0.04	0.73	0.80		0.05	0.66		
			933	747	0.27	0.023	977	498	177		0.56	308	119	001	7.78	473	246	
			145	533	9451	06391	337	265	230		6861	984	627	396	E-16	593	815	
			1	9	38	9	34	7	8		633	6	6	1		5	9	
cg55 5	Lysopc 18:3	bro	-0.0	0.47			-0.1	0.21	-0.0		-0.0	0.78	0.38		-0.0	0.85		
			897	356	0.02	0.823	536	814	177		0.88	341	551	988		0.00	225	754
			555	297	8060	02553	192	008	240		7671	402	723	577		1212	225	478
			58	6	794	6	75	8	54		84	01	3	1		096	06	7
cg29 5	Glycerophospho-N-palmi toyl ethanolamine	bro	0.08	0.50			-0.0	0.77	-0.0		-0.0	0.58			0.08	0.48		
			320	657	0.10		363	170	476		0.70	684	480		0.60	6.02	675	851
			355	069	1122	0.419	978	638	057		4259	835	846		835	E-08	879	505
			9	9	772		13	4	08		857	13	7		013		3	9
cg66	Dl-3,4-Dihydroxymandeli c Acid	bro	0.08	0.50			0.08	0.50	0.02		0.07	0.57	0.41		0.12	0.33		
			261	959	0.10	0.387	254	997	163		0.86	083	196	727		0.00	144	137
			495	270	8155	36047	021	706	562		3099	199	647	181		0491	151	589
			1	7	909	8	6	5	6		133	9	4	7		012	3	8
cg77	3-[(4-chlorobenzyl)thio]-1	bro	0.07	0.52	0.12	0.333	0.05	0.66	0.02	0.82	0.04	0.73	0.51	8.26	0.03	0.76		

9	-phenylpyrrolidine-2,5-di one	wn	944	601	0874	65625	502	077	735	7409	279	297	836	E-06	748	510
			699	432	279	5	815	604	470	374	302	857	680		108	423
			1	5			4	4	2		4	8	1		2	6
				0.57			-0.2	0.02	0.16		0.04	0.70	0.72		0.05	0.64
cg36	Uridine	bro	0.07	602	0.24	0.047	757	500	542	0.18	770	368	879	4.00	811	300
		wn	008	919	4475	89393	772	833	423	4375	340	097	794	E-12	489	676
			643	5	145	6	49	9	3	951	1	9	5		8	3
				0.63			-0.0	0.51	0.00		-0.0	0.79	0.37		-0.0	0.95
cg77	Eicosapentaenoic ethyl ester	acid bro	0.05	278	0.10	0.414	810	768	261	0.98	322	738	859	0.00	069	562
7		wn	990	913	2237	01216	478	322	711	3361	081	902	058	1721	831	209
			543	9	269	6	33	3	9	033	83	6	9	583	59	6
				0.68			-0.0	0.44	0.03		-0.0		0.90		0.11	0.37
cg84	LPE 14:0	bro	0.05	635	0.12	0.315	953	635	801	0.76	066	0.95	970	4.07	200	059
6		wn	064	370	5589	00163	429	385	353	1865	239	790	170	E-26	325	736
			103	2	206	1	77	2	2	199	04	303	2		9	2
cg39	PC (14:1e/4:0)	bro	0.04	0.72	0.15	0.208	-0.1	0.24	-0.0	0.91	-0.0	0.61	0.81	1.46	0.12	0.30
7		wn	387	647	6946	21451	443	766	137	2684	624	842	130	E-16	785	629

			804	035	073	2	090	662	596	537	423	929	370		034	768
			2	8			83	3	23		01	8	6		1	9
			-0.0	0.98			-0.1	0.22	-0.0		0.02	0.83	0.81		0.27	0.02
cg78		bro			0.05	0.641				0.92						
	LPE 15:0		029	125			527	081	122		667	162	436	9.11	014	825
5		wn	486	381	8302	93217	418	226	915	1969	656	459	257	E-17	933	447
			17	3	657	7	73	4	51	797	6	8	5		4	7
			0.58				0.26	0.03	0.34		0.79		0.27		0.19	
cg41		gree	313	2.78	0.49		484	163	850	0.00	096	2.76	730	0.02	794	0.11
	7-Methylguanine			E-0	9008	2.00E	230	328	185	4135	723	E-1	350	4184	460	111
7		n	032	7	159	-05	9	9	8	489	9	5	2	417	8	703
			7				9	9	8		9	5	2	417	8	703
			0.53				0.52		0.14				0.14			0.53
cg64		gree	268	4.14	0.36	0.002	279	6.70	147	0.25	0.56	8.08	514	0.24	0.07	176
	N1-[6-hydroxy-2-(2-pyridyl)pyrimidin-4-yl]acetamide			E-0	4236	64234	155	E-0	338	7178	417	E-0	817	4898	834	438
6		n	007	6	574	1	6	6	3	413	886	7	2	772	948	5
			3				6	6	3				2	772	948	5
			0.49	2.53	0.53		0.13	0.26	0.30	0.01	0.73	3.27	0.31	0.01	0.37	0.00
cg42		gree	369	E-0	8828	3.05E	875	651	935	1487	079	E-1	420	0192	653	183
	Glutamic acid															
3		n	497	5	198	-06	926	136	220	753	994	2	077	435	102	291

								4	8	9		3		9		7	
				0.49				0.19	0.11			0.76		0.25			0.00
cg83	L-Glutamic	acid	gree	325	2.58	0.46	7.34E	492	678	0.32	0.00	559	7.05	886	0.03	0.40	082
0	monosodium salt		n	315	E-0	8279	-05	617	388	439	7877	373	E-1	670	5836	169	865
				2	5	016		2	7	194	044	4	4	8	209	573	4
				0.48				0.27	0.02	0.21		0.88		0.38			0.25
cg52	4-Hydroxyisoleucine		gree	549	3.60	0.45	0.000	445	574	761	0.07	058	1.97	983	0.00	0.14	205
9			n	829	E-0	5153	12316	345	206	604	9217	095	E-2	365	1214	299	139
				2	5	117	8	3	3	8	541	8	2	9	095	283	7
				0.47				0.10	0.40	0.30		0.61		0.21			0.00
cg17	Royal jelly acid		gree	022	6.78	0.48	4.16E	402	583	855	0.01	934	2.96	365	0.08	0.35	359
6			n	996	E-0	2050	-05	803	869	524	1713	377	E-0	719	4970	351	374
				3	5	507		9	1	4	775	3	8	3	516	869	6
				0.46				0.30	0.01	0.07		0.62					0.19
cg12	DL- $\alpha$ -Methoxyphenylacet		gree	615	7.99	0.44	0.000	439	295	988	0.52	408	2.16	0.09	0.45	088	472
7	ic acid		n	990	E-0	4349	18578	300	783	858	3709	909	E-0	338	5773	147	162
				7	5	448	1	6	3	2	533	9	8	809	38	6	9

			0.45	0.00			0.15	0.22	0.31			0.29					
cg48	4-(trifluoromethyl)nicotin	gree	918	010	0.49		1.96E	013	887	334	0.01	0.75	3.97	0.01	0.31	0.00	
5	ic acid	n	930	526	9481		-05	960	207	743	0410	062	E-1	475	6284	887	
			6	1	962			8	9	4	75	236	3	243	98	667	
														4		7	
			0.41	0.00					0.01	0.04		0.72		0.22		-0.0	0.96
cg84	D-Ala-D-Ala	gree	492	053	0.35	0.003	0.29		0.69	0.69	4.45	0.22		0.06			
0		n	701	212	1033	85364	492	621	835	9848	772	879	E-1	4634	057	344	
			3	1	877	2	943	1	7	675	4	2	5	048	513	431	
														027	48	7	
			0.41	0.00			0.38	0.00	0.10		0.67			0.00	0.93		
cg71	N-(2-hydroxy-2-phenylet	gree	266	057	0.24		0.049	051	162	340	0.40	484	5.18	0.05	0.64	0.00	
1	hyl)-N'-(2-thienyl)urea	n	201	477	3270		03873	311	318	300	8680	E-1	702	9285	966	857	
			8	9	406			3	3	5	733	566	0	041	208	972	
															8	3	
			0.35	0.00			0.14	0.25	0.44		0.59		0.34		0.04	0.70	
cg90	(±)9-HpODE	gree	809	315	0.33	0.005	0.14	0.25	0.44		0.59		0.34		0.04	0.70	
		n	795	526	8644	41439	217	479	881	0.00	0.59	1.83	0.34	0.00	802	176	
			9	3	495	8	594	905	797	0156	026	E-0	440	4630	710	409	
										997	620	7	004	932	1	8	
cg22	O-Aceyl-L-Serine	gree	0.34	0.00	0.48	4.23E	-0.0	0.64	0.26	0.03	0.50	1.50	0.25	0.03	0.60	6.84	

8			n	848	413	1659	-05	575	614	488	1607	544	E-0	757	6805	631	E-0
				527	739	407		674	408	094	518	992	5	159	911	517	8
				5	4			48	8	7				1		6	
				0.33				0.26	0.02	0.12			0.90	0.07		-0.0	0.97
cg46	Glycocholic acid		gree	265	0.00	0.16	0.182	925	880	829		0.30	5.70		0.55	040	435
			n	438	635	6098	56845	493	165	372	4609	336	E-2	087	0032	347	063
				8	164	522	1	5	3	6	367	367	5	5	251	44	8
				0.29				0.23	0.05	0.10			0.89	0.08		-0.0	0.94
cg62	Glycohyocholic acid	acid	gree	247	0.01	0.14	0.255	618	623	872		0.38	1.99		0.51	085	562
	Sodium salt		n	221	717	2059	19300	727	105	154	4868	581	E-2	872	0087	579	833
				2	133	318	6	5	9	2	076	2	4	3	634	06	9
				0.28	0.01			0.23	0.05					0.10		-0.0	0.88
cg59	4-Aminobiphenyl		gree	947	839	0.20	0.094	968	257		0.05	0.63	0.75	2.58	0.41	178	693
5			n	693	816	7769	13107	954	440	879	9100	443	E-1	230	3683	416	134
				6	2	35		6	5	809	229	429	3	883	688	64	8
cg50	4-hydroxy-3-(3-methylbut		gree	0.27	0.02	0.07	0.538	0.33	0.00	0.01	0.92	0.39	0.00	-0.0	0.74	-0.0	0.82
5	-2-en-1-yl)benzoic acid		n	837	362	7105	31907	430	608	140	7556	681	097	412	1987	269	969





			9			09	5	5		9		4		9	4
cg44	(1E,4E)-1,5-bis(4-methoxy		0.22	0.06		0.11	0.36					0.09		0.10	0.37
2	phenyl)penta-1,4-dien-3-o	gree	654	737	0.14	0.261	222	966	0.09	0.45	0.93	1.45	0.43	988	975
	ne	n	882	144	0102	86324	109	159	276	8800	987	E-3	6057	927	296
			2	3	828		4	1	452	829	106	1	379	6	1
cg31	N2-Methylguanosine	gree	0.22	0.06		0.13	0.29	0.23		0.68		0.10		-0.0	0.72
0		n	610	792	0.28	0.022	098	447	575	0.05	836	1.69	0.39	446	213
			524	400	0870	34817	808	971	693	6694	596	E-1	0169	026	475
				8	149	8	4	8	3	294	4	0	325	31	9
cg44	Puerarin	gree	0.21	0.08		0.12	0.31	0.08		0.57		0.00		0.05	0.68
8		n	321	563	0.15	0.202	627	235	184	0.51	386	4.72	0.94	080	537
			672	048	9003	23852	310	247	196	3575	823	E-0	2673	739	711
			4	3	496		4	9	2	306	2	7	319	5	6
cg55	6-Methylquinoline	gree	0.20	0.10		0.15	0.20	0.03		0.93		0.02		-0.0	0.57
8		n	032	679	0.11	0.364	859	340	085	0.80	899	2.28	0.86	704	415
			611	744	3358	79731	970	163	726	5717	810	E-3	7439	296	738
			2	5	867	7	6	6	5	537	1	1	979	31	9

cg68 4	1-Methylguanine	gree n	0.19	0.11			0.18	0.14	0.28				0.11	-0.0		
			719	250	0.19	0.119	016	772	159	0.02	0.72	8.75	0.33	715	0.56	
			268	846	3372	78548	744	988	508	1989	089	E-1	7922	829		
					688	8				8	602	2		908	011	
			9	6		9	4	2			6	87				
cg53 4	Tyramine	gree n	0.19	0.11			0.10	0.38	0.06				0.01	-0.0	0.94	
			566	537	0.21	0.082	839	629	816	0.58	0.66	1.35	0.92	086	490	
			777	147	5422	36601	830	122	079	6583	270	E-0	1508	726	047	
					291	9				317	227	9		119	46	8
			5	5		2	4	7			6	46	8			
cg22 2	Hypotaurine	gree n	0.19	0.12			0.08	0.48	0.07		0.90		0.01	0.03	0.79	
			138	371	0.16	0.197	812	165	190	0.56	747	8.58	0.91	205	830	
			407	349	0589	71567	822	174	268	6155	043	E-2	3104	969	338	
					563	8				494	8	6		015	5	1
			8	5		5	9	9		8	2	5	1			
cg69 0	1-(4-methyl-2-morpholino -1,3-thiazol-5-yl)ethan-1-o ne	gree n	0.19	0.12			0.14	0.23	0.02		0.33	0.00	0.02	-0.0	0.88	
			117	413	0.13	0.281	953	076	741	0.82	386	615	210	0.86	178	712
			266	678	4585	30366	730	633	097	7059	655	123	450	0161	115	122
					196	9				793	3	3	6	798	05	5
			8	9		1	5	7		3	3	6	05	5		
cg40	Genistein	gree	0.18	0.13	0.10	0.424	0.09	0.42	0.06	0.62	0.94	8.57	0.00	0.93	0.02	0.83

		n	742	183	0003	33839	939	717	188	1599	900	E-3	986	7344	666	167
			107	314	778		629	222	012	477	862	4	416	742	780	910
			9	1			4	2	4		1		6		2	2
			0.17	0.15			0.13		0.03		0.94				-0.0	0.77
cg32	Glycitein	gree	639	654	0.07	0.558	820	843	046	0.80	983	5.15	0.01	0.91	365	097
1		n	346	626	3303	59691	814	843	971	8110	516	E-3	399	1210	175	561
			9	4	121	7	8	391	8	819	3	4	28	779	84	9
			0.17	0.16			0.12	0.32	0.03		0.93				-0.0	
cg69	4-morpholino-3-nitrobenz ene-1-sulfonamide	gree	310	454	0.06	0.579	315	454	432	0.78	531	1.40	0.02	0.85	267	0.83
5		n	194	852	9375	91320	457	905	637	4375	234	E-3	344	1744	066	143
			9	9	92	2	6	3	1	789	3	0	978	825	19	769
			0.15	0.20			0.22	0.06	0.01		0.89		-0.0		-0.1	0.33
cg60	Biotin	gree	699	807	0.01	0.900	618	782	253	0.92	383	5.63	609	0.62	195	888
7		n	291	709	5708	37815	235	768	231	0446	584	E-2	276	6986	823	670
			1	2	228	7	6	5	7	259	3	4	301	66	3	
			0.15	0.20	0.15	0.227	-0.0	0.68	0.12	0.32	0.91	6.08	0.12	0.32	0.20	0.09
cg17	gamma-Glutamyltyrosine	gree	0.15	0.20	0.15	0.227	-0.0	0.68	0.12	0.32	0.91	6.08	0.12	0.32	0.20	0.09
2		n	650	951	0551	58318	504	744	263	6603	513	E-2	402	1124	555	777



			5	3			9	6	7		3		2		14		
			0.12	0.33			0.06	0.59	-0.0		0.36	0.00				0.11	
cg63	Avobenzon	gree	066	450	0.05	0.672	717	201	390	0.75	279	275	0.09	0.43	0.19	628	
8		n	298	819	2983	65143	529	834	073	5830	976	521	783	4528	518	301	
				8	4	395	1	5	4	36	553	8	9	001	185	837	4
				0.08	0.47			-0.0	0.85	0.15		0.54		0.30		0.00	0.96
cg18		Rutin	gree	890	779	0.09	0.432	231	351	085	0.22	694	2.02		0.01		595
7	n		130	996	8200	78156	662	739	708	6629	493	E-0	852	1721	203	968	
				9	2	546	2	58	7	5	754	1	6	1	42	1	9
				0.08	0.51			0.07	0.56	-0.1		0.33	0.00	0.13		-0.0	0.89
cg51	2-[(3S)-1-(3,4-Difluoroben zyl)-3-pyrrolidinyl]-1,3-be nzoxazole		gree	108	749	-0.04	0.746	235	372	102	0.37	958	527	072	0.29	166	465
5		n	421	468	0618	07699	248	258	414	8218	615	872	116	5473	152	769	
				1	3	682	9	4	9	36	414	9	6	2	274	46	1
				0.51				0.32	0.00			0.22	0.06	0.19		0.08	0.47
cg75		L-Carnitine	grey	535	9.52	0.46		463	782	0.19	0.11	914	421	869	0.10	850	975
3			334	E-0	1766	9.51E	903	715	803	0943	067	459	569	9740	757	964	
				9	6	231	-05	1	1	9	297	9	6	5	412	2	8
				0.51				0.32	0.00			0.22	0.06	0.19		0.08	0.47
				535	9.52	0.46		463	782	0.19	0.11	914	421	869	0.10	850	975

cg58 9	(+) -ar-Turmerone	grey	0.49				0.52			0.06	0.60	0.03		0.19	0.12	
			955	1.95	0.26	0.029	850	5.08	0.13	0.27	540	185	966	0.75	058	531
			879	E-0	8267	41621	963	E-0	568	7351	136	795	839	1824	635	649
			5	5	263	3	2	6	572	799	6	6	7	423	6	7
			0.49				0.66			0.02	0.30	0.01	-0.0		-0.0	0.55
cg42 9	3-(3,4,5-trimethoxyphenyl )propanoic acid	grey	710	2.18	0.22	0.068	992	7.68	0.85	284	344	734	0.55	730	970	
			088	E-0	5534	64055	591	E-1	340	0659	782	788	444	7836	966	850
			7	5	316	1	4	0	3	696	3	4	61	732	1	7
			-0.4				-0.4	0.00	-0.2		-0.1	0.13	-0.1		-0.0	0.47
cg16 2	13,14-Dihydro-15-keto Prostaglandin E2	grey	871	3.36	-0.28	0.019	205	043	045	0.09	868	304	531	0.21	898	333
			233	E-0	6613	64025	968	766	853	9397	459	427	108	9685	026	020
			09	5	502	6	44	4	91	243	35	7	73	676	06	9
			0.48				0.56			0.12	0.23	0.05	-0.0		0.13	
cg74 3	Xanthosine	grey	616	3.50	0.23	0.053	819	6.48	404	0.32	933	293	463	0.71	508	0.27
			659	E-0	8980	29881	709	E-0	530	1034	833	210	601	1655	928	948
			7	5	292	5	7	7	9	917	7	8	34	068	8	892
			0.48				0.39	0.00	0.19	0.11	0.12	0.32	0.09	0.43	0.10	0.41
cg43	SDB-006 N-phenyl analog	grey	0.48	3.58	0.33	0.006	0.39	0.00	0.19	0.11	0.12	0.32	0.09	0.43	0.10	0.41

5			559	E-0	2663	35013	527	102	780	1365	325	414	685	9135	192	542
			796	5	371	5	034	090	980	506	660	529	650	948	911	817
			9				8	1	4		3	9	5		4	9
			0.48				0.44	0.00	0.21		0.09	0.44	0.06		0.22	0.06
cg40	N-Methylhydantoin	grey	522	3.64	0.29	0.016	830	016	352	0.08	556	528	896	0.58	531	891
8			285	E-0	2910	99768	529	007	841	5163	652	365	647	2156	362	915
			4	5	859	4	8	8	8	046	1	8	7	858	1	7
			0.48				0.00	0.04		0.02	0.83	-0.0		0.13		
cg49	2-{2-[(1-methyl-1H-pyraz	grey	354	3.91	0.32	0.008	0.36	223	118	0.74	577	722	003	0.99	793	0.26
1	ol-5-yl)amino]-2-oxoethox		518	E-0	3174	12685	991	567	709	2645	682	460	719	7635	023	940
	y}acetic acid		5	5	971	3	301	1	8	719	1	3	31	197	7	691
			-0.4				-0.6		-0.2		-0.2	0.09	-0.0		-0.1	
cg56	INK	grey	830	3.98	-0.11	0.337	148	3.98	257	0.06	069	550	600	0.63	023	0.41
9			973	E-0	9922	50383	004	E-0	514	8367	245	656	731	1835	684	341
			59	5	709		99	8	89	275	57	1	98	237	45	024
cg62	Sedanolid	grey	0.48	4.38	0.32	0.007	0.53	2.98	0.12	0.31	0.21	0.08	0.07	0.56	0.06	0.60
4			083	E-0	4386	87824	932	E-0	577	4266	164	802	193	5974	397	979



			065	5	016	3	023	6	853	794	094	469	611	505	961	569
			1				5		8		3	7	9		2	8
			-0.4				-0.7		-0.1		-0.1	0.23	-0.0		-0.0	0.92
cg12	Equol	grey	784	4.84	-0.25	0.042	593	1.47	999	0.10	493	127	866	0.48	119	382
2			231	E-0	0703	31999	434	E-1	7540		760	526	706	8958	979	825
			34	5	435	3	81	3	303		65	3	39	624	18	7
			-0.4				-0.4	0.00	-0.1		-0.1	0.26	-0.0		0.00	0.97
cg69	Cytidine	grey	776	5.00	-0.26	0.030	153	052	658	0.18	389	569	558	0.65	464	048
1			690	E-0	6070	82283	604	429	170	3321	948	236	151	6227	347	247
			92	5	254	7	85	3	1	508	51	2	16	523	5	1
			0.47				0.47		0.08		0.17	0.14	0.10			0.92
cg66	4',7-Dihydroxyflavanone	grey	107	6.55	0.37	0.001	576	5.41	101	0.51	970	878	210	0.41	0.01	768
0			649	E-0	6395	84044	811	E-0	7833		650	637	835	4604	138	665
			8	5	75	3	9	5	9	207	7	9	7	194	85	9
cg43	7-(2-hydroxypropan-2-yl)		0.46	7.46	0.28		0.49	2.24	0.08	0.47	0.09	0.46	-0.0	0.52	0.04	0.73
2	-1,4a-dimethyl-decahydro	grey	786	E-0	3684	98427	643	E-0	921	6240	092	777	804	0992	239	537
	naphthalen-1-ol		094	5	068		682	5	520	729	852	820	103	971	410	614

			5				5		4		5	7	18		5	8
cg54	3-amino-4-(propylamino)		0.46					0.00	0.11		0.18	0.13	0.20		0.20	0.10
5	cyclobut-3-ene-1,2-dione	grey	291	9.09	0.42	0.000	0.40	0.70	167	0.37	465	773	871	0.09	222	343
			498	E-0	4226	38550	666	303	322	2017	272	999	651	2607	963	919
			6	5	296	3	99	8	5	845	3	6	7	387	5	4
cg52	4-Butylresorcinol	grey	0.46				0.66		0.12		0.07	0.56	0.05		-0.0	
4			249	9.24	0.27	0.022	548	1.09	563	0.31	150	831	527	0.65	038	0.97
			652	E-0	9583	99629	869	E-0	582	4820	409	555	135	9369	562	548
			6	5	818	4	3	9	1	606	5	5	8	047	39	506
cg41	N-(2,3-dihydro-1H-inden-		0.45	0.00			0.63		0.06		0.05	0.68			0.06	0.58
2	2-yl)-4-hydroxybutanami	grey	516	012	0.29	0.016	990	7.27	781	0.58	004	984	0.04	0.73	903	176
	de		199	312	4375	42866	797	E-0	899	8465	769	081	249	4798	793	498
			2	6	688		9	9	2	807	7	1	018	488	7	8
cg67	$\alpha$ -Lapachone	grey	-0.4	0.00			-0.6		-0.2		-0.0	0.51	-0.1		-0.0	
5			527	013	-0.20	0.103	255	1.96	446	0.04	810	741	638	0.18	600	0.63
			035	536	2432	08580	208	E-0	826	7698	987	910	994	8510	194	214
			83	1	717	4	9	8	42	995	96	5	2	987	67	068

cg42 0	1,3-Dihydro-1,3,3-trimeth yl-2H-indol-2-ylidene acetaldehyde	grey	0.44	0.00			0.63	8.67	0.05	0.04	0.70	0.04	0.09	0.46		
			595	017	0.28	0.021	739	983	0.63	739	549	264	0.73	244	038	
			672	491	2873	36985	959	793	3173	669	892	077	3893	007	034	
			1	2	169		9	6	07	6	1	2	341	8	5	
cg84 1	LPC 18:0	grey	-0.4	0.00			-0.4	0.00	-0.2	-0.1	0.23		-0.1	0.29		
			433	019	-0.28	0.022	086	065	032	0.10	0.12	0.05	298	862		
			517	283	1324	12302	242	860	608	1654	494	139	556	6901	774	806
			41	6	438		01	7	78	391	61	984	576	065	87	4
cg37 1	Tetranor-12(S)-HETE	grey	0.43	0.00			0.49	2.31	0.05	0.03	0.78	-0.1	-0.0	0.62		
			172	029	0.21	0.087	573	276	0.67	496	046	057	0.39	606	840	
			783	521	1708	92071	622	504	E-0	3924	398	988	467	8083	777	283
			3	7	671	8	8	5	2	352	4	8	41	373	45	2
cg81 8	Glutaric Acid	grey	0.41	0.00			0.21	0.08	0.41	0.18	0.12	0.22	0.06	0.60		
			664	050	0.38	0.001	100	094	0.00	975	700	046	0.07	549	136	
			971	162	7177	31996	395	900	0609	324	742	380	5273	004	434	
			4	7	706	8	1	736	171	9	5	7	824	9	4	
cg32	Pantothenic acid	grey	0.41	0.00	0.35	0.003	0.27	0.02	0.06	0.58	0.38	0.00	0.17	0.16	0.12	0.31

4			309	056	9192	05774	709	429	865	3867	566	138	224	6678	566	472				
			356	642	943	5	557	529	485	139	944	372	594	062	154	072				
			4				9	1	2		3	7	3		8	4				
			-0.4	0.00			-0.1	0.41	-0.0		-0.2	0.04	-0.2		-0.1	0.21				
cg33	Palmitic Acid	grey			-0.28	0.018				0.62				0.05						
				103	062			024	300	610		496	326	338		550	372			
3				131	227	8560	78834		567	536	148		070	039	329		855	540		
				43	9	112	2		41	3	52		09	1	78		04	6		
			0.41	0.00					0.13		0.19	0.12	0.13		0.01	0.90				
cg55	3-hydroxy-2-octylpentane dioic acid	grey			0.31		0.46	8.93		0.27				0.27						
				001	062		0.009		335	E-0	771		045	558	497		534	265		
3				301	859	8249	21008		335	E-0	547	0160		272	655	679		9893	740	525
				4	9	095		902	5		7	426		7	8	5		223	5	6
			0.40	0.00			0.50		-0.0		0.27	0.02	0.06		-0.0	0.96				
cg64	6beta-Naltrexol-d3	grey			0.26			1.62		0.99				0.59						
				710	069		0.033	379		E-0	014		952	302	607		047	952		
2				340	295	2554	19069	479		5	419	0831		595	581	633		8105	941	537
				9	4	756		2		5	99	688		7	8	1		581	08	5
cg50	Lasamide	grey	0.40	0.00	0.23	0.057	0.40	0.00	0.08	0.52	0.05	0.65	0.06	0.59	0.03	0.75				
3				257	080	5353	13162	835	066	058	0076	655	198	686	3726	873	747			

			443	508	268	7	682	453	673	003	099	550	639	551	679	191
			3	4			3	1	8			4	6		7	7
			-0.4	0.00			-0.5		-0.0		-0.0	0.87	-0.0		-0.0	0.57
cg18	L-Glutathione oxidized	grey	020	081	-0.17	0.164	356	3.57	175	0.88	191	857	262	0.83	702	507
2			769	835	3197	31305	980	E-0	433	8810	707	028	867	4049	620	128
			56	3	101	5	61	6	08	033	14	9	48	81	01	7
			0.40	0.00			0.20	0.09	0.13		0.09	0.44	0.11			0.00
cg37	Apocynin	grey	199	082	0.31	0.011	912	196	103	0.29	572	454	213	0.37	0.40	075
3			477	056	0061	28989	039	358	204	4316	063	669	835	0016	435	921
			9	3	102	4	8	4	4	297	3	3	8	838	342	4
			-0.4	0.00			-0.1	0.13	-0.0		-0.1	0.32	-0.1		-0.0	
cg76	4-(3-methoxy-5,6-dihydro	grey	014	083	-0.30	0.013	858	520	978	0.43	223	787	428	0.25	968	0.43
0	benzo[c]acridin-7-yl)mor		982	403	1306	95248	278	879	114	4615	171	526	544	2515	199	930
	pholine		3	7	708	8	28	4	74	659	06	4	92	287	17	966
			-0.3	0.00	-0.09	0.431	-0.7	4.88	-0.1	0.11	-0.1	0.19	-0.0	0.59	-0.0	0.72
cg48	NG,NG-Dimethyl-L-argin	grey	990	090	8521	27399	487	E-1	957	5199	612	586	669	3159	436	797
2	ine		692	287	049	3	499	3	584	684	446	891	689	052	272	304

			72	9			32	51		34	6	74		39	4	
			-0.3	0.00			-0.7	-0.2		-0.1	0.22	-0.0		-0.0		
cg65	2-[(3S)-1-Benzyl-3-pyrroli				-0.14	0.253		9.38		0.08			0.45		0.62	
6	dinyl]-1,3-benzothiazole	grey	974	095	2514	65679	427	E-1	7735	511	558	926	9229	617	243	
			946	021	811	9	463	3	714	919	855	764	477	326	228	
			56	2			47	35		18	6	13		43		
			-0.3	0.00			-0.3	0.01	-0.1		-0.1	0.20	-0.1	-0.0	0.67	
cg37	N-Acetylglycine				-0.33	0.006			0.20				0.20			
8		grey	911	116	1831	49101	002	432	579	592	159	594	0869	517	982	
			595	416	025	8	062	272	252	278	419	807	876	552	303	
			6	1			41	2	52	92	9	6		27	2	
			0.38	0.00			0.32	0.00	-0.0			0.71	-0.0	0.01	0.92	
cg81	Prostaglandin H1				0.18	0.138			0.88	0.04			0.84			
9		grey	793	128	4194	73675	883	702	182	4467	507	933	242	6577	138	771
			735	886	441	3	699	074	330	748	164	306	770	085	435	288
			2	8			1	1	62			4	29	9	1	
			-0.3	0.00			-0.3	0.00	-0.1		-0.0	0.45	-0.1	-0.1	0.30	
cg31	Nicotinic acid				-0.25	0.038			0.16				0.34			
6		grey	848	141	5530	37857	951	102	711	9343	943	120	170	9480	277	672
			577	917	251	6	023	642	856	729	323	990	033	711	386	401
			2	7			41	8	66		57	6	71	3	9	

			0.38	0.00			0.49	0.04		0.07	0.57			0.10	0.38	
cg71	3b,7b-Dihydroxy-5-andro		372	146	0.18	0.130	256	2.66	0.69	094	136	0.14	0.25	902	353	
7	sten-17-one	grey	639	994	8077	46013	806	E-0	2165	184	903	111	8392	567	190	
			2	8	945	8	9	5	978	7	5	6	661	427	7	5
			-0.3	0.00			-0.4	0.00		-0.1	0.31	-0.0		-0.0	0.50	
cg58	L-Histidine		809	160	-0.20	0.093	080	067	-0.0	0.58	250	708	862	0.49	833	596
1		grey	005	397	8237	37626	973	032	693	0029	533	720	635	1009	217	505
			18	7	046	6	08	8	547	386	92	2	56	694	4	3
			0.37				0.34	0.00	0.24		0.07	0.31		0.23	0.06	
cg40	3-(propan-2-yl)-octahydro		848	0.00	0.30	0.012	796	419	879	0.04	0.21	975	379	0.01	079	226
0	pyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4	grey	005	172	7496	02002	635	738	040	3971	723	354	954	0294	188	639
	-dione		8	74	365	8	7	5	9	93	775	8	1	585	2	8
			0.37	0.00			0.01	-0.0		0.02	0.81	-0.0		0.01	0.90	
cg38	p-Mentha-1,3,8-triene		218	208	0.19	0.114	031	060	149	0.90	972	271	324	0.79	544	202
3		grey	239	942	6341	09922	260	290	120	5403	552	142	716	5767	707	618
			7		776	4	912	3	2	935	8	7	52	308	4	3
cg38	2-Benzyl-5-[(3S)-1-isopro	grey	-0.3	0.00	-0.12	0.318	-0.5	4.26	-0.0	0.52	-0.1	0.24	-0.0	0.53	-0.0	0.56

2	pyl-3-pyrrolidinyl]-1,3,4-oxadiazole		721	209	4777	16319	757	E-0	791	7502	458	247	768	9412	716	737
			316	260	838	1	071	7	623	867	870	904	987	243	783	098
			43	2			91		03		65	1	88		09	
			0.36	0.00			0.45	0.00	0.01		-0.0	0.98	-0.1		-0.0	
cg39					0.15	0.225				0.91				0.37		0.96
8	D-(+)-Camphor	grey	591	251			201	013	330		022	560	115		048	
			394	579	1315	20660	054	900	732	5544	646	138	819	2411	574	912
					016	8				035				208		274
			6	9			5	7	7		97	1	66		79	
			0.36				0.25	0.03	0.14		0.00	0.95	0.07		0.27	0.02
cg52				0.00	0.30	0.013				0.25				0.52		
7	NAT13-331713_POS	grey	228				968	523	143		712	471	936		475	557
			863	279	1335	94286	169	697	957	7293	583	633	818	6426	369	407
				64	655	2				282				144		
			4				4	4	6		5	1	9		7	6
			-0.3	0.00			-0.2	0.09	-0.1		-0.1	0.35	-0.1		-0.1	0.39
cg33					-0.27	0.027				0.35				0.26		
4	Methyl palmitate	grey	589	307			066	588	146		164	162	385		072	133
			782	665	0663	94403	964	068	663	9255	864	854	340	7295	577	762
					267	8				952				945		
			5	1			25	5	51		5	8	36		89	9
cg78			0.35	0.00	0.34	0.004	0.26	0.02	0.07	0.54	0.06	0.59	0.16	0.18	0.06	0.58
6	2-Deoxyuridine	grey	587	336	5174	53361	775	973	664	0743	653	556	550	4172	806	710



			611	168	058	2	664	823	729	548	521	040	007	009	539	845
			7	5			2	1	2		8	1	4		9	
cg70	5-(sec-butyl)-2-hydroxybe		-0.3	0.00			-0.2	0.06	-0.1		-0.1	0.30	-0.1		-0.1	0.36
	nzaldehyde	grey	557	337	-0.26	0.029	300	312	354	0.27	281	499	446	0.24	144	014
3	N-phenylhydrazone		552	325	8449	30202	606	319	567	8171	925	427	779	6447	564	211
			29	2	462	1	35	9	22	051	03	3	6	209	36	5
			0.35	0.00			0.43	0.00			0.11	0.37	0.07		0.06	0.61
cg50	16-Heptadecyne-1,2,4-trio		434	351	0.22	0.068	251	028	0.12	0.32	103	478	123	0.56	259	758
8	1	grey	246	108	5795	31247	767	693	406	0960	292	310	757	9762	216	538
			5	7	125	1	9	4	414	889	7	5	1	052	1	8
			0.35	0.00			0.53		0.08		0.11	0.36	-0.0		0.00	0.94
cg50	Desthiobiotin		045	391	0.18		787	3.20	0.50	0.50	376	308	082	0.94	910	215
0		grey	045	702	8868	82182	739	E-0	6300	6300	093	774	190	7778	552	488
			9	8	631		8	6	396	396	8	1	01	468	5	5
			0.34	0.00	0.33	0.005	0.13	0.27	0.39	0.00	0.13	0.29	0.15	0.21	0.09	0.44
cg1	Methylmalonic acid	grey	748	425	6837	68341	496	994	180	1140	169	185	368	7936	571	459
			498	372	263	1	106	977	529	52	611	482	649	296	137	094

			1	3			9	2		6	9	9		5	2	
			0.34	0.00			0.27	0.02	0.02		0.10	0.39	0.14		0.02	0.81
cg84					0.33	0.006				0.83			0.23			
5	Boc-beta-cyano-L-alanine	grey	662	435	0255	76530	299	657	620	4536	661	421	930	1502	872	890
			895	556	023	7	488	144	857	363	149	454	403	88	601	038
			5	5			8	7	2		3	4	2		4	3
			-0.3	0.00			-0.2	0.06	-0.0		-0.0	0.49	-0.1		-0.0	0.44
cg39					-0.23	0.061				0.45				0.42		
1	trans-Anethole	grey	411	506	1056	95885	264	744	931	7044	859	265	001	3582	946	983
			121	522	341	4	913	281	260	313	378	380	661	99	187	067
			25	8			66	1	38		88	3	03		81	5
			0.34	0.00			0.17	0.16	0.17		0.04	0.72	0.21		0.22	
cg77					0.40	0.000				0.17				0.08		0.06
6	6-Aminonicotinamide	grey	065	512	4594	75317	354	344	084	0207	390	629	650	0805	862	483
			080	895	939	3	934	351	467	612	748	403	148	005	236	617
			7	3			4	2	8		2	3	4		4	
			0.33	0.00			0.45	0.00	0.01		0.20	0.09	0.00		0.02	
cg40					0.13	0.266				0.90				0.97		0.82
3	Hippuric acid	grey	985	523	8723	63708	978	010	513	4018	558	771	441	1965	795	365
			961	989	143	9	248	284	144	522	631	757	011	25	892	767
			1	4			8	2	4		9	6	9		5	

cg47	(2S)-4-Oxo-2-phenyl-3,4-dihydro-2H-chromen-7-yl beta-D-glucopyranoside	grey	-0.3	0.00			-0.3	0.01	-0.1		-0.1	0.35	-0.1	-0.0	0.58	
			377	553	-0.24	0.045	109	104	096	0.38	157	457	108	0.37	680	734
			978	899	6589	93745	531	510	132	0958	808	335	757	5464	217	879
			2	9	919	2	8	8	6	318	86	5	01	009	5	2
cg33 8	Indole-3-acrylic acid	grey	-0.3	0.00			-0.5		-0.1		0.02	0.83	-0.0	-0.0		
			359	581	-0.08	0.514	266		5.57	0.32	673	126	425	0.73	584	0.64
			682	690	1756	01413	255	E-0	233	3761	512	039	613	4370	052	134
			53	6	975	4	64	6	61	9	8	2	95	398	58	528
cg69 3	N-(2-oxo-3-azepanyl)-5-(2-pyridinyl)-2-thiophenesulfonamide	grey	0.33	0.00			0.13	0.28	0.09		-0.0	0.99	0.17	0.06		
			582	583	0.37	0.002	408	311	313	0.45	006	588	799	0.15	569	0.60
			344	941	3554	00520	481	276	606	6995	477	125	749	2752	202	024
			1	8	66	9	4	6	1	668	88	5	2	677	6	08
cg31 5	DL-Tryptophan	grey	-0.3	0.00			-0.5		-0.1		0.02	0.81	-0.0	-0.0	0.63	
			344	605	-0.07	0.539	254		5.91	0.33	991	152	413	0.74	598	282
			445	765	6975	00574	050	E-0	205	5084	767	293	798	1483	984	903
			11	1	64	7	62	6	03	282	8	6	46	307	16	7
cg22	13(S)-HOTrE	grey	-0.3	0.00	-0.04	0.719	-0.6	8.58	0.27	0.02	0.00	0.98	0.02	0.84	-0.0	0.64

7			304	673	4967	95249	375	E-0	688	4410	284	192	518	0940	569	990
			047	882	894		583	9	041	48	379	009	058	026	130	256
			43				9		2		8	6	6		2	4
			0.32	0.00			0.58		0.04		0.10	0.40	-0.0		-0.0	0.71
cg79	Pyrogallol	grey	797	718	0.10	0.392	180	3.00	927	0.69	418	512	485	0.69	461	286
3			498	011	7064	19803	356	E-0	072	4416	574	343	910	8428	559	991
			5	5	205	7	6	7	5	927	2	3	86	724	48	2
			0.32	0.00			0.41	0.00	0.05		0.08				0.07	0.53
cg70	Kinetin	grey	575	760	0.16	0.199	771	048	746	0.64	367	0.50	0.06	0.62	681	987
4			776	469	0007	36612	008	365	873	6710	690	414	155	3448	142	450
			2	9	817	4	6	7	2	467	1	718	287	068	8	7
			0.32	0.00			0.17	0.16	0.33		0.14	0.26	0.13		0.03	0.80
cg46	dimethyl	grey	071	865	0.26	0.029	315	441	356	0.00	033	107	079	0.29	091	538
5	2-(3-nitro-2-pyridyl)malo		749	248	7445	93621	674	288	100	6201	236	465	471	5199	138	346
	nate		3	8	01		8	7	9	217	3	9	1	286	6	1
cg74	6-phenyl-1,2,3,4-tetrahydr	grey	0.31	0.00	0.21	0.088	0.18	0.13	0.01	0.88	-0.0	0.71	0.08	0.51	0.02	0.83
4	o-2,5-benzodiazocin-1-on		794	927	1194	71293	671	332	875	1161	457	509	086	8655	656	229

	e		974	978	226		529	054	856	748	829	082	034	469	812	909
			1	5			7	3	5		74	4	9		5	5
cg63	5,8-dihydroxy-10-methyl-		0.31	0.00			0.31	0.00	0.08			0.66	0.04		0.05	0.64
4	5,8,9,10-tetrahydro-2H-ox	grey	701	950	0.19	0.116	833	919	820	0.48	0.05	320	724	0.70	814	285
	ecin-2-one		030	152	5293	08329	114	105	429	1272	460	029	367	6406	127	576
			8	7	162	2	9	3	8		959	2	7	526	4	2
cg17	N1-{3-[3-(2,6-dichlorophe		-0.3	0.00			-0.4		-0.1		-0.1	0.28	0.06		0.03	0.75
5	nyl)isoxazol-5-yl]phenyl}	grey	166	957	-0.17	0.150	991	1.98	071	0.39	-0.1	323	942	0.59	980	097
	acetamide		916	777	9041	32011	988	E-0	727	1715	564	074	688	0739	938	086
			89	3	67	4	55	5	63	4	23	5	5	101	4	3
cg35	Theobromine	grey	-0.3	0.01			-0.1	0.19	-0.0		-0.0	0.44	-0.0		-0.0	0.43
7			148	002	-0.26	0.029	599	963	994	0.42	959	322	985	0.43	972	705
			461	997	7885	65683	118	926	140	7089	976	390	555	1111	953	554
			81	1	269	6	72	5	24	36	08	6	74	773	28	3
cg19	1-(4-Methoxyphenyl)-2-pr		-0.3	0.01	-0.16	0.173	-0.3	0.00	-0.1	0.19	-0.1	0.27	-0.1	0.25	-0.0	0.65
4	opanone	grey	145	010	9454	76290	232	810	603	8309	360	593	417	6251	567	105
			660	021	525	2	867	362	797	674	822	703	465	497	124	629

			35	2			5	3	94		39	3	52		36	4
			-0.3	0.01			-0.4		-0.0		-0.0	0.48	-0.0		-0.0	0.46
			145	010	0.01	0.907	674	7.59	0.54		868	826	254	0.83	916	417
cg28	Testosterone sulfate	grey	283	969	4636	14082	245	E-0	9935		084	545	993	8953	630	523
			3	8	992	2	57	5	818		18	2	58	17	6	3
			-0.3	0.01			-0.5		-0.1		-0.1	0.26	-0.0		0.00	0.95
			126	058	-0.16	0.188	255	5.88	0.26		384	762	629	0.61	761	158
cg60	14,15-Leukotriene E4	grey	772	505	3829	70168	136	E-0	4185		405	194	044	5828	955	247
			03	6	685	3	09	6	983		81	9	25	512	1	9
			-0.3	0.01			-0.5		0.13		-0.0	0.68	0.02		0.03	0.76
			124	064	-0.15	0.225	909	1.76	0.28		504	736	776	0.82	675	951
cg99	alpha-Ketoglutaric acid	grey	328	923	1199	56630	165	E-0	8225		681	931	433	4865	778	064
			26	8	086	1	22	7	241		09	4	5	482	8	5
			-0.3	0.01			-0.4	0.00	0.00		-0.1	0.28	0.11		-0.0	0.42
			059	248	-0.06	0.588	067	070	603	0.96	335	503	030	0.37	989	917
cg81	Gly-Tyr	grey	261	693	7861	22996	602	092	902	1617	541	974	728	7931	683	513
7			11	1	787	8	53	5	4	193	48	7	4	893	15	2

cg6	Sucrose	grey	0.30	0.01			0.21	0.07	0.20		0.21	0.08	0.15		0.03	0.80	
			326	331	0.27	0.023	777	898	030	0.10	143	833	794	0.20	076	626	
			458	415	7795	92361	898	756	398	6836	773	723	240	5305	913	161	
					787	5				968					131		
			7	9			5	1	8		9	9	9		7	3	
cg71 2	13-HPODE	grey	0.30	0.01			0.52		-0.0		0.07	0.53	-0.0		-0.1	0.13	
			237	360	0.12	0.326	499	6.03	178	0.88	837	165	905	0.46	882	010	
			186	201	2760	11342	143	E-0	127	7113	001	652	913	9437	497	275	
					024	9		6		434					31		
			2	9			5		43		3	7	16		81	4	
cg33 1	D-(+)-Maltose	grey	0.29	0.01			0.26	0.03	0.21			0.06	0.14		0.01	0.92	
			958	453	0.24	0.048	070	449	925	0.07	0.22		530	048	0.26	243	106
			553	525	3426	88876	891	360	711	6925	823		611	320	0557	383	939
					904	4				361	314				306		
			2	7			9	1	8			4	4		7	7	
cg75 5	5-(tert-butyl)-N-[4-(trifluo romethyl)phenyl]thiophe ne-2-carboxamide	grey	0.29	0.01			0.27	0.02	0.09		0.01	0.93	0.06		0.05	0.65	
			924	465	0.16	0.192	678	446	667	0.44	083	119	333	0.61	681	048	
			293	372	2306	90172	247	306	073	0018	521	111	549	3406	091	974	
					458	1				321					701		
			9	2			2	5	7		4	5	9		8	1	
cg72	Stearoyl Ethanolamide	grey	-0.2	0.01	-0.30	0.011	-0.2	0.05	-0.1	0.30	-0.1	0.12	-0.0	0.48	-0.1	0.38	

6			991	467	9047	57367	366	571	290	1737	888	881	875	4433	082	673
			762	687	652	6	738	098	516	313	717	529	718	849	978	422
			65	3			71		57		98	1	79		28	7
			0.29	0.01			0.28	0.02	0.17		0.07	0.52	0.34		0.32	0.00
cg61	Triacanthine	grey	585	587	0.23	0.058	129	213	449	0.16	973	449	331	0.00	459	783
4			408	100	4043	57002	198	904	952	1114	803	473	486	4770	534	595
			4	9	062	4	3	2	7	8	1	3	1	486	6	2
			-0.2	0.01			-0.2	0.05	-0.2		-0.2	0.01	-0.1		-0.0	0.90
cg81	diethyl		942	646	-0.32	0.008	414	078	029	0.10	911	771	472	0.23	144	839
3	2-(3-chloroanilino)malonate	grey	920	070	0306	74315	731	815	087	2261	301	207	032	8209	379	828
			41	8	831	8	41	8	92	044	49	7	98	413	22	4
			0.29	0.01			0.45	0.00	-0.0		0.09	0.42	0.09		-0.0	0.56
cg61	morphine-d3	grey	254	714	0.17	0.160	582	012	449	0.72	983	512	227	0.46	715	828
0			736	147	4800	38262	065	002	523	0045	576	108	469	1186	093	684
			6	2	366	5	5	5	9	071	2	9	6	632	89	2
cg68	2-cyano-3-(3,4-dimethoxyphenyl)acrylic acid	grey	0.29	0.01	0.28	0.022	0.19	0.11	0.10	0.39	0.16	0.17	0.10	0.39	0.10	0.37
1			150	755	0931	31762	792	114	569	8299	796	763	702	2380	990	967



			590	922	568	4	942	499	862	29	444	357	318	516	701	558
			5	8			6	3	6		5	5	2		3	5
			0.29	0.01			0.26	0.03	0.27				0.18		0.06	0.58
cg73	2-fluoro-6-[4-(methylsulfi	grey	005	815	0.30	0.011	040	471	801	0.02	0.09	0.46	0.14		835	548
8	nyl)phenoxy]benzotrile		035	766	8508	72703	409	281	753	3806	241	051	354	0150	988	810
			2	5	91	4	1	8	3	919	311	177	883	119	5	2
			0.28	0.01			-0.0	0.67	0.10		0.08	0.47	0.23		0.08	0.48
			913	854	0.28	0.021	524	586	361	0.40	995	257	705	0.05	771	371
cg58	D-Gluconic acid	grey	789	163	2968	32433	330	159	686	7706	530	517	206	5309	513	666
5			9	4	248		32	7	8	994	4	7	6	469	4	6
			-0.2	0.02			-0.5		-0.1		-0.0	0.51	-0.0			0.95
		852	026	-0.07	0.549	869	2.22	478	0.23	808	895	311	0.80	0.00	847	
cg32	2'-Deoxyinosine	grey	215	944	4990	55231	996	E-0	6095	6095	031	217	703	3785	653	046
			22	8	76		09	7	46	649	69	4	52	379	454	2
			-0.2	0.02	-0.12	0.311	-0.0	0.59	-0.0	0.50	-0.1	0.16	-0.0	0.75	-0.1	0.36
cg79	Tetrahydroaldosterone	grey	851	029	6536	33487	671	234	828	8570	728	510	383	9849	122	932
0			633	610	798	2	154	924	138	433	771	571	452	507	993	587

			72	2			27	1	63		96	3	2		27	1
			-0.2	0.02			-0.6		-0.0		0.04	0.70	0.02		0.26	0.03
					0.01	0.918		1.83		0.97				0.82		
cg34	2'-O-Methylguanosine	grey	832	120	2787	83432	265	E-0	031	9671	770	364	737	7282	532	130
			255	154	1	4	370	8	975	617	979	308	508	776	940	969
			73	9			43		33		8	2	1		8	1
			-0.2				-0.0	0.76	-0.0		-0.1	0.18	-0.2		-0.1	0.18
				0.02	-0.16	0.186				0.79				0.06		
cg51	Hexadecanamide	grey	820	174	4543	75562	371	684	330	2394	663	187	313	1581	634	974
0			871	933	742	3	944	955	200	627	601	052	826	079	506	059
			54				51	2	38		77	4	47		5	9
			-0.2	0.02			-0.1		-0.0		-0.1	0.41	-0.1		-0.0	0.45
					-0.23	0.054		0.18		0.42				0.36		
cg81	PC (18:5e/22:6)	grey	819	183	8003	31003	650	531	995	6536	009	997	140	1972	927	908
0			101	556	254	9	768	23	323	723	435	552	237	875	069	087
			57	8			06		25		86	5	64		53	4
				0.02				0.17	0.11		0.06	0.59	-0.0		0.25	
			0.27		0.23	0.053	0.17			0.37				0.94	746	0.03
cg20	gamma-Nonanolactone	grey	976	290	8806	47766	078	036	148	2828	752	006	092	1113	746	688
7				314				827	524		910	447	696		442	
			679		393	7	14			38				929		712
				3				9	8		9	2	73		2	

cg13 6	12-oxo Phytodienoic Acid	grey	0.27				0.31	0.01	0.18		0.08	0.49	0.05		0.15	0.22			
			960	0.02	0.17	0.148				0.14					0.64				
			004	298	9972	17640	004	129	276	1886	609	186	722	8111	278	067			
				802	336	4	945	312	229	625	395	556	471	338	536	925			
			6				2	1	2		3	2	9		9	7			
cg40 5	N-Acetyl-L-glutamic acid	grey	0.27	0.02			0.31	0.00	0.07		0.08	0.48	0.14			0.35			
			581	498	0.20	0.103	786	929	841	0.53	797	240	902	0.23	0.11	292			
			867	566	2179	52737	934	858	669	1411	747	476	947	2371	617	144			
				867	9	045	3	1	5	3	353	5	3	1	891	623	5		
				9				1	5	3		5	3	1			5		
cg46 3	2-{2-[4-(tert-butyl)phenyl]-4-hydroxy-1,3-thiazol-5-yl}acetic acid	grey	-0.2	0.02			-0.2	0.02	-0.1		-0.0	0.45	-0.0		0.21	0.07			
			724	689	-0.11	0.368	739	604	047	0.40	927	877	422	0.73	923	696			
			365	486	2552	23970	130	676	744	2459	700	416	621	6170	044	218			
				13	6	732	6	59	1	84	734	03	3	08	027	7	7		
				13	6			59	1	84		03	3	08		7	7		
cg37 9	SKK	grey	0.27	0.02			0.27	0.02	-0.0		0.07	0.54	0.01		0.00				
			040	809	0.22	0.063	453	569	053	0.96	661	089	195	0.92	485	0.96			
			722	834	9810	41882	481	644	897	5741	825	735	553	4096	156	916			
				1	1	185	9	6	8	11	468	6	2	6	533	5	032		
				1	1			6	8	11		6	2	6		5			
cg31	5-Hydroxyindole-3-acetic	grey	0.26	0.03	0.20	0.100	0.21	0.08	-0.0	0.99	0.07	0.57	0.00	0.95	0.02	0.85			

8	acid		720	008	4087	24031	702	005	015	0315	051	368	662	7908	316	351	
			782	763	96		306	901	231	919	586	751	311	065	629	718	
			7	1			1	7	24		4	8	1		3		
			0.26	0.03			0.30	0.01	0.09		0.06	0.58	0.09		-0.0	0.98	
cg57	5,5-dimethyl-3-morpholin		581	098	0.23		0.055	807	185	153	0.46	809	694	080	0.46	019	773
5	ocyclohex-2-en-1-one	grey	947	692	7110	24788	102	297	586	4798	569	166	558	8382	293	310	
			8	1	275		6	4	4	057	4	2	1	737	8	2	
			0.26	0.03			0.22	0.06	0.14			0.09	0.11		0.04	0.72	
cg15	17-AAG		557	114	0.16	0.195	957	369	415	0.24	0.20	488	445	0.36	448	285	
8		grey	870	514	1253	84510	393	871	746	8169	730	349	278	0157	265	203	
			7	7	11	2	9	4	8	017	604	7	8	528	6	7	
			0.26	0.03			0.21	0.08	0.02		0.20	0.09			0.12	0.32	
cg87	Neopterin		250	322	0.22	0.070	568	198	576	0.83	878	250	0.02	0.83	317	447	
		grey	438	569	3727	94822	474	421	007	7328	309	102	632	3794	301	604	
			1	4	53		3	2	9	88	2	2	78	336	9	5	
cg28	Acetophenone		0.26	0.03	0.32	0.008	0.08	0.48	0.02	0.81	0.01	0.91	0.13	0.27	0.04	0.73	
6		grey	245	326	1569	46692	734	555	950	4076	413	029	673	3606	200	768	

			463	028	774	7	891	119	493	361	824	167	851	038	960	946
			8	9			4	8	6		4	4	6		1	4
				0.03			0.10	0.41	0.04		-0.0	0.75	0.14		0.11	0.37
cg47	2-phenyl-2,4,6,7-tetrahydr		0.26		0.25	0.035				0.69				0.22		
6	othiino[4,3-c]pyrazol-3-ol	grey	149	393	9698	22483	116	893	939	3668	388	651	983	9813	159	233
			444	400	327	1	870	430	767	503	942	650	977	695	922	680
				8			2	4	2		52	2	7		4	1
			0.26	0.03			0.17	0.15	-0.0			0.41	0.03		0.00	
cg30	3,5-Dihydroxyphenylglyc				0.28	0.022				0.92	0.10			0.75		0.98
6	ine	grey	120	413	0602	48192	517	946	122	2041	280	142	869	7715	270	282
			814	707	123	8	903	453	802	182	259	169	660	839	169	342
			6	5			1	4	72			8	7		2	
			0.25	0.03			0.18	0.14	-0.0		0.26	0.03	0.00		0.20	0.09
cg45	Triethanolamine				0.21	0.082				0.90				0.95		
6		grey	877	590	5079	86734	203	350	149	5464	418	207	761	1631	538	805
			832	170	14	5	440	796	024	281	637	347	175	947	315	669
			5	1			2	2	64		4	2	7		9	8
cg31	N-Acetylneuraminic acid		-0.2	0.03	-0.07	0.571	-0.2	0.03	-0.0	0.42	-0.1	0.39	-0.0	0.81	0.13	0.28
7		grey	586	600	0929	43742	555	834	998	5014	068	305	300	0840	387	386
			418	303	268	3	722	564	586	299	714	604	279	981	671	740



cg5	Cholic acid	grey	0.25				0.22	0.07	0.03		0.20	0.10	0.13		0.03	0.77	
			360	0.03	0.21		0.078	276	220	259	0.79	229	331	759	0.27	624	262
			448	991	8096		5405	403	397	129	5031	952	746	817	0572	791	126
			3	293	8			4	1	2	178	9	2	2	604	2	6
cg51 2	N-Acetyl-DL-valine	grey	0.25	0.04			0.09	0.44			0.09				0.08	0.48	
			251	080	0.38	0.001		459	994		0.07	0.56	0.44	0.19	0.11	799	233
			292	496	3927	46080		442	785		255	2653	697	752	1891	101	711
			3	4	518	4		8	4		045	368	8	936	528	356	2
cg23 5	Pro-Leu	grey	-0.2	0.04			-0.7		-0.1		-0.0	0.43	0.06			0.88	
			498	303	0.13	0.267		593	1.47		0.32	982	253	437	0.60	0.01	369
			657	692	8406	74023		395	E-1		9992	539	000	425	7587	835	635
			59	3	69	7		98	3		162	81	8	6	822	565	5
cg36 4	2-(4-chlorophenyl)-N,N-d imethylethanethioamide	grey	0.24	0.04				0.10	0.00		0.07	0.56	0.00		0.02	0.82	
			943	340	0.20	0.105	0.20		558	606	0.96	276	148	845	0.94	741	705
			935	569	1256	14638	100		894	271	1466	627	879	814	6261	134	751
			3	7	076	7	57		6	7	716	3	3	3	232	3	6
cg73	KQH	grey	0.24	0.04	0.14	0.253	0.10	0.38	0.05	0.64	-0.0	0.93	0.16	0.19	0.05	0.67	

1			720	538	2556	51654	888	416	722	8105	095	932	031	8480	244	576
			353	223	491	6	189	324	566	92	525	030	946	742	911	771
			3	2			6	2	3		45	4	5		5	
			0.24						-0.0		0.17		-0.1		-0.0	0.99
cg73	5,6-Dimethylbenzimidazo	grey	688	0.04	-0.06		0.61	3.97		0.62		0.16		0.37	001	933
4	le		547		5754	89569	483	E-0		2787		915		4791	051	152
			4		933	1	464	8		918		142		003		
			4						89			6		02	36	6
			0.24	0.04			0.13	0.27	0.08		0.11		0.16		0.03	
cg66	DI-Lanthionine	grey	603	644	0.14	0.251	568	735	442	0.50	308	0.36	040	0.19	596	0.77
2			140	765	3062	81860	431	680	927	0307	595		8240		433	
			9	8	317	5	8	9	5	339	790	22	418	55	787	12
			9	8			8	9	5		4	22	2	55	8	12
			0.24	0.05			0.18	0.14	-0.0		0.01	0.88	0.00		0.03	0.79
cg47	4-Acetamidobutyric Acid	grey	218	008	0.09	0.433	167	430	062	0.96	784	688	540	0.96	226	706
1			468	954	8094	28109	853	567	704	0147	837	908	687	5632	112	306
			2	9	487	3	2	3	12	705	7	9	3	444	8	7
cg47	6-(Dimethylamino)purine	grey	0.24	0.05	0.28	0.018	-0.0	0.78	0.12	0.30	0.06	0.59	0.03	0.76	0.05	0.66
5			070	154	8785	69172	338	717	893	2161	658	527	678	9336	465	295



			643	982	609	6	702	328	944	402	690	400	635	47	151	729
			3	8			3	5	7		9	6	5		9	2
			-0.2	0.05			-0.0	0.42	-0.0		-0.0	0.82	-0.1		-0.0	0.57
cg68	LNH				-0.17	0.151				0.74				0.41		
8		grey	382	401	8558	44185	998	524	404	7144	277	468	014	7609	706	317
			847	706			083	877	420	093	932	585	556		093	811
			84	9	612	7	68	9	77		71	2	08	439	89	7
			-0.2	0.05			-0.7		0.03		-0.1	0.30	0.07		-0.0	0.92
cg23	Phe-Pro				0.05	0.645		2.51		0.77				0.53		
0		grey	375	477	7709	33021	098	E-1	649	1128	292	115	843	1335	111	944
			565	753			345	1	250	638	056	592	115	392	109	476
			69	1	362	8	01		2		53	6	8		02	9
			0.23	0.05			0.22	0.06	0.02			0.76	0.04		0.01	0.93
cg28	8-Hydroxyquinoline				0.24	0.046				0.83	0.03			0.70		
0		grey	622	619	6418	09340	930	401	690	0208	729	622	764	4032	053	308
			016	577			912	362	437	04	755	164	406	56	680	176
			9	7	663	5	6	8	3			2	4		3	6
			-0.2	0.05	-0.17	0.152	-0.1	0.25	-0.0	0.55	-0.0	0.53	-0.0	0.46	-0.0	0.54
cg80	PC (20:5/20:5)															
0		grey	354	700	8145	40552	423	407	744	2528	774	634	918	3148	759	470
			741	034	746	8	905	527	340	137	795	386	728	73	011	283

			77	8			47	1	42		95	1	98		23	1
			0.23	0.05			-0.0		0.10		0.06	0.62	0.22		0.20	0.10
cg11	LPC 20:4	grey	532	716	0.37	0.001	029	0.98	278	0.41	052	924	780	0.06	072	607
1			090	680	6962	80906	613	117	500	1502	856	909	058	5831	994	802
			5	8	563	3	1	313	1	154	6	6	5	589	8	8
			0.23	0.05			0.00	0.97	0.02		-0.0	0.51			0.12	0.32
cg59	$\alpha$ -Ergocryptine	grey	418	841	0.19	0.121	462	057	976	0.81	823	084	0.13	0.28	283	582
8			709	047	2652	19613	865	662	744	2452	712	683	478	0569	226	663
			8	4	877	3	7	2	2	147	04	5	874	967	6	8
			-0.2	0.05			-0.2	0.06	-0.0		-0.0	0.70	-0.0		-0.0	0.64
cg73	Azilsartan	grey	338	877	-0.15	0.217	287	464	782	0.53	474	540	802	0.52	583	179
5			553	853	3859	41169	789	785	383	2348	124	535	445	1855	258	935
			09	2	747	6	68	9	36	419	74	7	75	192	74	5
			0.23	0.05			0.34		0.03			0.83	-0.0		-0.0	0.73
cg27	(S)-Nicotine	grey	374	890	0.04	0.701	267	0.00	864	0.75	0.02	412	160	0.89	423	591
1			201	464	8142	08146	403	485	160	8049	627	846	403	8282	050	181
			2	4	45	9	2	463	4	703	411	4	97	605	36	5

cg36 3	Leucylproline	grey	-0.2	0.06			-0.7	-0.1		-0.0	0.46	0.13		-0.0	0.75		
			319	087	0.17	0.165	171	1.26	0.17	0.17	922	138	069	0.29	385	855	
			990	252	2524	98319	E-1		8035		350	020	792	5559	588	201	
					371	4		1	238					863			
			57	5			56		76		16	2	8		65	1	
cg19	Theophylline	grey	-0.2	0.06			-0.1	0.42	-0.0		-0.0	-0.0		-0.0	0.65		
			288	452	-0.16	0.189	002	332	445	0.72	519	0.67		0.57	555	767	
			847	092	3693	07571	208	842	674	2345	587	863	978	8698	640	727	
					052	4				017		287		768			
			36	6			42	4	58		08		44		55	6	
cg45 7	2-Amino-1,3-octadecaned iol	grey	0.22				0.38	0.00	0.17			0.45	0.02		-0.1	0.16	
			778	0.06	0.22	0.066	216	154	867	0.15	0.09			0.85	726	575	
			060	585	7614	05845	317	278	835	1163	271	902	300	4496	149	764	
				594	698	1				221	774	839	964	841			
			7				7	9	3			1	6		3	8	
cg70 5	2-phenyl[1,3]oxazolo[4,5- c]quinolin-4(5H)-one	grey	0.22	0.06			0.20	0.10	0.06		0.23	0.05	0.16		0.03	0.80	
			764	601	0.15	0.202	171	433	098	0.62	498	753	851	0.17	131	288	
			690	909	9062	06890	546	811	163	6680	358	454	685	6191	666	283	
					517	7				432				38			
			5	9			7	6	1		3	7	3		6	2	
cg33	SM (d29:0/13:1)	grey	0.22	0.06	0.21	0.079	0.14	0.23	-0.0	0.86	0.03	0.78	0.01	0.91	0.02	0.86	

6			726	648	7423	49031	934	138	210	6815	389	704	394	1532	155	359
			736	403	279	6	271	062	427	856	118	472	186	687	705	153
			4	2			4	9	57		3	4	4		5	
			0.22	0.06			0.10	0.40	0.15		0.05	0.65	0.07		0.10	0.41
cg75	Sinapyl aldehyde	grey	611	791	0.24	0.050	403	580	595	0.21	654	201	153	0.56	304	029
6			584	075	1598	66436	551	477	670	1132	559	656	479	8149	844	806
			7	2	637	7	3	7	7	298	4	9	1	075	2	9
			0.22	0.06			0.05	0.66	-0.1		0.22	0.07	-0.0		-0.0	0.65
cg83	3,8,9-trihydroxy-10-propy	grey	578	833	0.27	0.028	423	536	153	0.35	348	125	498	0.69	555	791
9	l-3,4,5,8,9,10-hexahydro-2	grey	115	001	0267	18257	570	870	622	6327	868	787	218	1170	232	281
	H-oxecin-2-one		5	3	945	4	1	1	3	861	5	2	21	015	87	2
			0.22	0.06			0.22	0.07	0.12		0.06	0.58	0.07		0.14	0.24
cg57	trans-2-Methyl-2-penteno	grey	523	901	0.19	0.113	071	493	104	0.33	795	771	072	0.57	383	925
	ic Acid		564	780	6500	80165	674	124	813	2956	535	448	123	2569	109	286
			6	9	25	8	9	4	7	276	1	6	1	223	2	2
cg58	Taurodeoxycholic acid	grey	0.22	0.07	0.12	0.321	0.20	0.09	0.13	0.27	0.17	0.15	0.08	0.51	-0.0	0.76
7	sodium salt		391	070	3877	69543	851	292	528	8801	704	500	164	4616	380	139

			819	180	415	2	700	672	068	911	159	511	033	74	913	210		
			7	2			4	2	8			7	1		58	3		
			-0.2	0.07			-0.0	0.76	0.01		-0.0	0.73			0.02	0.82		
cg18	Prostaglandin E3	grey			-0.11	0.365				0.89			-0.1	0.18				
1				229	200			382	067	597		422	627			817	230	
				146	646			100	097	388		441	791			639	831	
						794	7					125			779	354		
					84	2			14	4	9		73	9			7	3
			0.22	0.07			0.07	0.56	0.03		-0.0	0.86	0.11			0.51		
cg52	Coproporphyrin tetramethyl ester	III grey			0.15	0.204				0.75				0.34	0.08			
3				256	246			202	549	876		211	602	732			066	
				775	195			404	859	417		7305			8134	240		471
						586	8					765			745	658		8
			3	6			7	3	5		13	5	8					
			0.22	0.07			0.17	0.16	0.13		0.08	0.50	0.05		0.11	0.34		
cg66	4,6,8-trihydroxy-7-methoxy-3-methyl-3,4-dihydro-1H-2-benzopyran-1-one	grey			0.22	0.070				0.29				0.65				
5				204	315			433	150	118		359	454	655		763	686	
				360	448			989	429	560		3745			1975	608	285	
						595	7					886			123			
			7	5			9	7	8		8	9	3		1	2		
			0.22	0.07	0.06	0.590	0.18	0.13	0.25	0.04	0.02	0.82	0.00	0.98	0.06	0.59		
cg76	16 $\alpha$ -Hydroxydehydroepiandrosterone	grey																
8				115	433	7446	52142	444	819	195	1268	722	821	214	6339	750	018	
				895	531	315	5	490	132	319	732	457	785	863	251	712	577	

			6	3			7	3	9		6	4		7	6		
cg77 8	5-hydroxy-6,7-dimethoxy -2-phenyl-4H-chromen-4- one	grey	-0.2	0.07			-0.4		-0.1		-0.1	0.31	-0.0		0.01		
			202	560	-0.18	0.144		0.00		0.41		255	518	449	0.72	0.91	
			194	592	1407	91532		016		4426		414	725	571	0016	435	
			77	4	552	1		901		607		23	8	64	566	406	
									43		14					9	
cg60 6	Stearamide	grey	-0.2	0.07			-0.0	0.64	-0.1		-0.2	0.03	-0.0		-0.1	0.41	
			200	581	-0.36	0.002				0.22		609	429	041	0.97	0.23	345
			652	615	2908	74649		830	182	680	1650	885	349	161	3833	584	611
			49	6	955	3		830	182	680	949	885	349	161	019	584	611
								45	3	27		84	6	95		43	6
cg17 4	Liquiritigenin	grey	0.21	0.07			0.06	0.63	0.09			0.06	0.20		0.11	0.35	
			890	740	0.33	0.006		018	118	727	0.43	0.23		0.10	670	071	
			895	719	0346	74908		832	098	355	7158	135	160	396	0445	543	766
			7	4	673	2		6	2	1	65	833	916	754	232	543	766
								6	2	1			8	3		3	5
cg11 0	Hydroquinone	grey	0.21				0.20	0.09	0.12			0.72	0.07		0.04	0.72	
			383	0.08	0.16	0.173		941	149	188	0.32	0.04		0.55	447	287	
			201	470	9507	62631		703	296	144	9614	387	647	468	1168	959	031
				969	545	9		703	296	144	104	723	522	830	052	959	031
			5					9	6	5			4	8		9	8

cg69 8	N-{6-[4-(tert-butyl)phenoxy]-3-pyridinyl}-N'-(2-thienyl)urea	grey	0.21	0.08	0.20	0.106	0.06	0.62	0.04	0.69	0.00	0.97	0.21	0.08	0.04	0.69
			382	471	0612	28707	048	947	902	5862	377	597	046	9848	939	366
			909	403	386	2	821	810	573	09	908	539	282	899	854	334
			8	6			1	2	8		5	6	3		7	2
cg76	3-Methyl-2-oxobutanoic acid	grey	-0.2	0.08	-0.04		-0.4	0.00	-0.0	0.58	-0.0	0.60	-0.0	0.73	0.03	0.75
			125	658	6957	0.708	284	033	691	0915	642	854	425	4626	887	660
			823	809	457	10529	919	148	930	033	036	164	188	25	93	721
			45	2			11	2	07		9	5	31			6
cg91	Capryloylglycine	grey	-0.2	0.08	-0.12	0.326	-0.1	0.19	-0.0	0.58	-0.0	0.63	-0.0	0.62	-0.0	0.55
			115	811	2572	86003	619	381	688	2664	591	684	617	2147	741	393
			841	200	147	2	767	953	740	006	932	506	830	589	717	265
			23	1			7	8	28		61	2	5		85	4
cg65 7	D-Ribulose 1,5-bisphosphate	grey	0.21	0.08	0.15	0.207	0.11	0.34	0.13	0.27	0.06	0.58	0.08	0.51	0.01	0.88
			155	815	7024	98511	919	046	764	0400	918	097	108	7508	845	308
			339	924	272	6	589	128	726	05	220	421	155	435	347	088
			5	4			9	3	6		7	6	8		2	3
cg84	Tanespimycin	grey	0.21	0.08	0.30	0.012	0.04	0.72	0.11	0.36	0.09	0.43	0.31	0.01	0.19	0.12

2			144	832	6595	28601	380	692	255	8224	839	187	316	0458	114	418
			871	033	476	8	241	335	625	608	325	474	407	187	694	835
			5	4			8	4	8		5	6	2		9	8
			-0.2	0.09			-0.1	0.16	0.14		0.14	0.25			-0.0	0.45
cg26	Guanine	grey	066	595	-0.00	0.943	721	702	809	0.23	207	514	0.03	0.79	939	301
9			490	852	8947	15506	084	203	603	5343	481	064	327	0806	574	869
			47	7	822		33	2	8	186	1	9	851	279	58	9
			-0.2	0.09			-0.2	0.06	0.01		-0.1	0.35	0.08		0.11	
cg57	RKK	grey	061	679	-0.13	0.282	272	644	598	0.89	159	402	414	0.50	344	0.36
2			405	714	4312	28970	990	515	543	8629	130	076	170	1773	240	444
			15	7	204	4	18	5	8	275	07	9	1	222	7	171
			0.20	0.09			0.11		0.06		0.06	0.62	0.11		0.15	0.22
cg63	Milbemycin A3 oxime	grey	606	692	0.25	0.040	276	0.36	420	0.60	080	768	433	0.36	194	326
0			065	936	3202	23985	591	732	041	8559	377	827	216	0667	272	598
			2	7	108	6	3	746	9	945	3	6	2	374	2	5
cg61	2,6-Dihydroxybenzoic acid	grey	0.20	0.09	0.16	0.195	0.19	0.11	0.12	0.30	0.04	0.72	0.09	0.44	0.02	0.81
			583	730	1472	22863	334	983	941	0372	478	106	653	0660	930	531



			269	755	782	5	489	971	349	401	123	741	577	009	424	861
				5			8	6	8		5	2	2		8	1
			-0.2	0.09			-0.1	0.21	-0.0		-0.1	0.35	-0.0		0.10	0.40
cg43	1-Methylhistamine	grey	048	896	-0.22	0.065	554	255	751	0.54	148	867	353	0.77	365	751
9			398	803	8045	53328	773	629	534	8683	035	755	273	8246	917	452
			97	7	796	7	62	4	93	913	35	1	31	5	5	8
			0.20	0.10			0.25	0.04	0.00		0.03	0.75	-0.0		0.05	0.65
cg46	SM (d15:1/29:1)	grey	409	022	0.07	0.523	044	253	780	0.95	952	269	375	0.76	628	350
1			970	033	9840	95932	525	989	463	0407	517	181	205	4863	719	491
			8	5	675	7	9	5	9	823	5	6	9	755	6	8
			0.20	0.10			0.28		-0.0		0.05	0.68	-0.0		0.26	0.03
cg16	Undecanedioic acid	grey	384	065	0.16	0.174	147	0.02	766	0.54	051	710	881	0.48	503	150
5			356	655	9081	72614	779	204	787	0576	283	655	800	1392	022	811
			5	5	466	6	2	745	62	873	8	8	79	88	9	6
			0.20	0.10	0.05	0.665	0.30	0.01	0.07	0.54	-0.0	0.86	-0.0	0.86	0.05	0.63
cg77	ALK	grey	183	412	4140	92291	038	426	609	3691	215	383	220	0284	918	687
1			923	118	216	6	130	326	154	076	181	525	849	288	757	750

			4	3			1	6	7		68	2	47		2	2
			-0.1				-0.2	0.09	0.05		-0.1	0.35	-0.0		-0.1	0.11
cg61	RNH		999	0.10	-0.27	0.027	076	429	259	0.67	156	498	793	0.52	974	195
9		grey	734	742	1943	18298	655	925	451	4919	826	445	942	6289	920	287
			95	87	823	8	42	1	3	111	77	1	88	732	63	1
			-0.1	0.10			-0.5		-0.1		-0.0	0.63	0.10		0.07	0.56
cg82	gamma-Glutamylmethionine		999	744	-0.03	0.790	375	3.26	245	0.31	591	732	578	0.39	224	432
		grey	670	024	3337	44335	204	E-0	787	8942	094	315	858	7895	090	564
			62	2	588	6	42	6	52	035	37	6	6	647	6	4
			0.19	0.10			0.24	0.04	0.09		0.06	0.57	0.06		0.02	
cg50	Salsolinol		976	780	0.14	0.229	948	336	882	0.42	997	663	054	0.62	676	0.83
9		grey	403	503	9869	72105	853	302	384	9852	525	616	894	9133	773	105
			7	5	238	3	7	8	2	461	2	1	9	44	5	762
			0.19	0.10			0.15	0.21	0.12		0.00	0.96	0.10		0.09	
cg71	Thiazolidine-4-carboxylic acid		884	947	0.20	0.090	424	625	244	0.32	625	022	380	0.40	249	0.46
5		grey	057	639	9970	62008	417	081	257	7375	757	923	517	6850	164	012
			5	1	418	8	3	8	9	55	4	6	1	752	3	911

cg62 5	L-Cystathionine	grey	0.19	0.10			0.10	0.40	0.05		-0.0	0.88	0.13		0.03	0.80	
			870	972	0.11	0.351	516	071	234		0.67	180	541	937	0.26	033	893
			442	449	6601	14817	126	539	119		6397	829	264	274	4382	712	002
				7	891	7					826				168		
							1	5	6			23	9	5		7	8
cg38 5	CE 18:2	grey	-0.1	0.11			-0.0	0.58	-0.0		-0.0	0.79	-0.0		-0.0	0.84	
			982	057	-0.12	0.336	689	230	068		0.95	327	376	767	0.54	243	641
			412	174	0201	37303	386	958	458		6493	966	811	868	0004	029	546
					663	6					728				841		
			54	5			32	6	68			4	5	03		18	5
cg75	10-Undecenoic acid	grey	0.19	0.11			0.22	0.07	0.10		0.05	0.67	0.05		0.04	0.70	
			694	297	0.16	0.183	150	387	708		0.39	268	437	712	0.64	823	053
			001	904	5691	65733	483	183	899		2087	853	058	927	8659	475	536
					739	3					811				603		
			2	7			6	7	1			4	2	7		8	8
cg74 9	Sinapinic acid	grey	0.19	0.11			0.09	0.44			0.00	0.98	0.06		0.02	0.84	
			643	391	0.16	0.173	614	251		0.13	0.26	163	960	880	0.58	406	790
			860	734	9616	34544	649	375		786	9634	498	476	956	3017	496	120
					672	7				529	639				756		
			1	5			5	1				1	3	3		8	3
cg36	Cer-NDS (d18:0/24:1)	grey	0.19	0.11	0.23	0.058	0.09	0.43	0.03	0.76	0.05	0.66	0.02	0.85	0.07	0.54	

6			524	618	4149	45231	679	941	793	2312	380	788	298	4631	497	961
			226	026	293	6	766	533	998	36	263	371	812	458	914	432
			1	9			2	9	6		9	4	4		5	1
			0.19	0.11			0.22	0.07	-0.0		0.04		0.16		-0.0	0.80
cg74	6,9-dimethoxy-11H-inden		456	747	0.05		0.667	045	528	038	0.97	0.69	0.18		316	061
6	o[1,2-b]quinoxalin-11-one	grey	764	144	3885	39939	522	546	997	5208	641	875	804	7287	851	065
			8	6	986		8	5	18	739	1	182	6	517	98	2
			-0.1	0.12			-0.6		-0.0		-0.0	0.58	0.06		0.17	0.16
cg22			932	003	0.22	0.066	622	1.39		0.53	683	548	007	0.63	139	881
6	Gly-Phe	grey	432	819	7058	74085	993	E-0	812	0022	598	821	571	1820	474	561
			66	3	623	6	42	9	69	809	65	2	7	918	8	6
			0.19	0.12			0.26	0.03	-0.0		-0.0	0.90	-0.0		-0.0	0.89
cg38	Naringin		283	083	0.01	0.933	093	433	238	0.84	145	743	308	0.80	170	204
		grey	731	348	0407	90412	531	153	360	9331	903	564	648	5670	303	126
			2	5	024	4	4	7	23	218	16	2	37	796	78	3
cg25			-0.1	0.12	-0.13	0.280	-0.0	0.61	-0.0	0.71	-0.0	0.75	-0.0	0.65	-0.0	0.68
1	Caffeine	grey	904	549	4852	34171	631	460	450	9425	394	295	568	0447	509	469

			986	364	133	6	223	378	561	43	813	719	182	655	244	056		
			76	7			31	3	68		68	2	35		04			
			0.18	0.12			0.23	0.05	0.08		0.00		-0.0		-0.0	0.89		
cg67	5-Hydroxyindole	grey			0.10	0.390				0.48		0.98		0.98				
3			856	944			508	742	795		260		018		8132	165	511	
			776	337			7372	82888			2507		345			666	427	473
							37	6			142		92		11			
					2	9			1	1	8		6		18		48	5
				0.12				0.27	0.05		0.05	0.65	0.12		0.10	0.41		
cg27	L-Pyroglutamic acid	grey	0.18		0.20	0.104	0.13			0.63				0.32				
0				975				746	985		535	891	406		0960	248	288	
			841		1344	99022	565		100	920	3052	001	422	418		708	227	830
			936		622	1	517		2	8	058		9	4	6		8	6
			0.18	0.13			0.28	0.01	0.09		-0.0	0.95	-0.0		0.02	0.85		
cg40	N-Propionylglycine	grey			0.06	0.606				0.42				0.81				
7			693	285			823	892	899		069	613	296		3356	213	994	
			548	515			4498	89147			9047		019	753	212	803	894	609
							854	4			502		71	2	15		9	8
					2	7			8	3	3							
			0.18	0.13	0.33	0.006	-0.0	0.81	0.05	0.65	0.11	0.35	0.12	0.32	0.07	0.54		
cg28	N-Acetylhistamine	grey																
7			373	973	4209	09554	291	645	666	1330	479	871	354	3022	531	780		
			963	130	541	5	208	429	473	76	348	990	064	941	756	905		

			3	9			4	3	9		4	9	4		3	
cg72	6-methyl-5-(2-methyl-1,3-		0.18	0.14			0.25	0.03	-0.0		-0.0	0.89	-0.0		-0.0	0.82
0	thiazol-4-yl)-2-(phenylthi	grey	190	379	-0.00	0.990	720	708	051	0.96	158	975	114	0.92	282	168
	o)nicotinonitrile		585	573	1523	31508	857	159	106	7513	073	293	209	7481	761	977
			4	2	255	1	3	8	96	978	21	9	69	046	13	1
cg24			0.18	0.14			0.06	0.62	0.01		0.01	0.87	0.18		0.08	0.48
3	Taurocholic acid	grey	156	455	0.26	0.033	169	262	291	0.91	992	380	801	0.13	821	122
			558	955	2595	16207	909	180	962	7996	939	326	684	0587	431	199
			9	972	3		2	4	2	034	8	8	2	399	7	5
cg84	(3beta,9xi)-3-(beta-D-Gluc		0.18	0.14			0.07	0.57	0.04		-0.0	0.91	0.14		0.04	0.72
7	opyranosyloxy)-14-hydro	grey	113	553	0.11	0.350	014	573	144	0.74	141	012	799	0.23	471	148
	xycard-20(22)-enolide		196	731	6791	35953	078	254	689	1079	643	664	819	5656	053	987
			2	2	627	5	8	2	9	067	61	1	9	141	2	6
cg56	7-Hydroxy-3,4-dihydroca		0.18	0.14			0.32	0.00	-0.0		-0.0		-0.0		0.01	0.90
7	rbostyryl	grey	047	703	0.03	0.775	006	879	090	0.94	039	0.97	125	0.92	451	790
			352	144	5796	37727	004	804	048	2793	696	476	807	0139	557	773
			7	3	651	2	9	3	75	211	41	437	95	53	7	5

cg54 4	N1-(2-amino-2-oxoethyl)- 2-(isopropylthio)acetamid e	grey	-0.1	0.14			-0.4	0.00	-0.0		-0.0	0.67	0.11		-0.0	0.73
			798	837	-0.01	0.923	002	086	669	0.59	531	143	766	0.34	428	242
			865	309	1982	92709	796	795	454	3289	915	873	750	6733	844	936
			3	2	303	9	9	6	35	26	64	1	5	155	64	9
cg36 7	Spermidine	grey	-0.1	0.14			-0.4		-0.0			0.19	0.01		-0.0	0.54
			797	862	0.08	0.503	658	8.08	503	0.68	0.16	055	257	0.92	750	897
			769	463	3829	36615	643	E-0	656	7971	315	059	474	0177	992	337
			15	8	693	8	12	5	38	421	617	2	6	799	36	3
cg10 8	Thymidine 3,5-cyclic monophosphate	grey	-0.1	0.15			-0.1	0.30	-0.2		-0.2	0.10	-0.1		-0.1	0.34
			770	497	-0.21	0.083	294	039	419	0.05	010	550	514	0.22	181	455
			525	923	4984	00614	076	459	270	0341	514	789	743	4712	967	324
			15	6	425	3	07	2	05	629	91	9	27	971	59	5
cg63 6	benzoylecgonine-d3	grey	0.17	0.15				0.22	0.00		-0.0	0.78	-0.0		-0.0	0.83
			584	786	0.04	0.707	0.15	582	742	0.95	337	764	281	0.82	262	454
			111	862	7089	31934	111	101	402	2823	934	448	199	2658	064	929
			1	8	849	8	707	4	7	482	42	7	96	22	95	1
cg57	Tangeritin	grey	0.17	0.16	0.11	0.372	0.09	0.42	0.07	0.52	0.03	0.78	0.00	0.98	0.00	0.98

7			392	252	1602	32391	916	823	948	5832	497	037	252	3945	193	770
			178	781	213	4	920	434	176	646	876	939	522	18	446	075
				2			1		5		7	5	7		9	1
			0.17	0.16			0.16	0.19	-0.0		0.19	0.12	0.06		0.00	0.98
cg28	5'-S-Methyl-5'-thioadenos		182	773	0.09	0.457	211	344	116	0.92	105	437	818	0.58	212	647
5	ine	grey	470	339	2968	80762	236	168	399	6094	157	973	980	6423	790	102
			6	3	844		4	2	32	561	7	8	2	7	2	1
			-0.1	0.17			-0.0	0.71	-0.0			0.79	-0.0		-0.0	0.73
cg49	Guaiacol		699	252	-0.11	0.372	452	809	433	0.72	-0.0	746	466	0.71	424	478
7		grey	345	912	1454	96203	789	557	259	9779	321	526	258	0075	923	547
			68	9	274	7	94	2	7	455	958	8	27	347	45	5
			-0.1	0.17			-0.0	0.85	-0.0		-0.0	0.63	-0.1		0.02	0.87
cg21	Xylitol		692	441	-0.13	0.296	236	024	507	0.68	588	853	331	0.28	039	085
9		grey	028	229	0453	4717	897	522	149	5919	974	267	164	6635	840	859
			54	6	523		31	2	15	926	88	4	65	586	4	3
cg77	8-Aminooctanoic acid		0.16	0.17	0.15	0.224	0.17	0.14	0.11	0.33	0.02	0.82	0.11	0.37	0.06	0.59
0		grey	917	448	1463	74614	986	841	952	9100	749	651	074	6010	683	389



			425	619	614		777	612	989	226	916	202	966	395	525	887				
			6	9					3		5	9	1		6	7				
			0.16	0.17			0.18	0.13			0.01	0.93	0.09		0.07	0.57				
cg75	Coniferin	grey			0.13				0.09	0.44				0.42						
7			909	469		0.262	420	871			066	225	999		008	605				
			405	356		73699	553	255			804	018	918		249	067				
			9	8		048			203	397					761					
								6	7			8	3	8		5	5			
			0.16	0.17			0.11	0.37	-0.0		0.02	0.85			0.01	0.89				
cg34	UR-144 N-Heptyl analog	grey			0.20	0.091				0.88			0.03	0.79						
1			881	542		9330	62963			176	160	181		4943	216	977	641	590		
			166	518		77	5	791	996	575		182			557	937	275	4022	800	122
			9	7				4	1	15					3	2	524	718	5	5
			-0.1	0.17			-0.3	0.00	-0.0				-0.0	0.68	-0.0		0.13	0.26		
cg21	19(R)-Hydroxy-prostagla ndin E2	grey			-0.08	0.473				0.65				0.43						
4			681	721		9807	30405			673	241	561		4406	504	776	981	2976	784	969
			238	664		894	1	179	407	307		519			008	426	592	135	855	334
			06	7				12	2	79					9	4	27		3	6
			0.16	0.17	0.25	0.042	-0.2	0.07	-0.0	0.99	-0.0	0.87	0.21	0.08	0.03	0.75				
cg39	FMH	grey	744	898	0888	16310	212	426	006	5615	197	508	208	7349	940	344				
6			893	715	31	2	081	922	895	551	247	881	168	8	132	213				

			8	5			73	2	78		31	2	1		7	
cg73	6-[(4-methylphenyl)sulfo		0.16	0.18					0.02		-0.0	0.59	-0.0		-0.1	0.26
0	nyl]-6-azabicyclo[3.2.1]oct	grey	635	189	-0.06	0.621	0.49	2.96	0.84		660	830	066	0.95	379	920
	ane		064	591	1983	01516	002	E-0	7119		400	687	974	7436	875	621
			5	3	65	8	96	5	071		76	2	08	322	05	5
			0.16	0.18			0.14	0.25	0.02		0.12		0.01			0.35
cg44	indoline-2-carboxylic acid	grey	596	292	0.23	0.054	279	271	212	0.86	728	030	381	0.91	0.11	113
4			434	709	7915	40160	536	374	531	0031	007	847	597	2328	660	129
			7	5	52	3	2	2	2	5	1	805	1	373	595	4
			0.16	0.18			0.22	0.06	-0.0		0.02	0.83	-0.0		-0.0	0.84
cg11	Naringenin	grey	578	339	0.02	0.820	791	569	132	0.91	660	209	062	0.96	252	050
			840	815	8525	14439	457	278	577	5857	054	742	492	0281	499	777
			3	6	323	1	3	6	57	492	6	8	73	952	22	9
			-0.1	0.19			-0.0	0.87	-0.0		-0.0	0.88	-0.0		-0.1	0.37
cg50	2-methyl-1H-benzimidaz		629	108	-0.11		0.348	202	179	864	0.48	177	778	0.43	104	752
7	ole-5-carboxylic acid	grey	636	139	7171	78433	498	086	839	9898	062	363	003	7979	000	852
			8	1	391		89	4	39	741	99	6	84	064	37	4

			-0.1	0.19			-0.3	0.00	0.00		-0.0	0.47	0.15		0.09	0.43	
cg38	3-(3,4-dihydroxyphenyl)propanoic acid	grey	617	437	0.09		0.461	538	356	301	0.98	892	621	981	0.19	690	891
0			763	897	2219		45376	260	270	432	0836	203	522	712	9909	254	742
			66	1	939			92	1	2	16	42	7	8	25	3	9
			0.16	0.19				0.07	0.55	0.04		-0.0	0.88	0.11		0.01	0.88
cg43	1,4-Dihydro-1-Methyl-4-Oxo-3-Pyridinecarboxamide	grey	068	743	0.08	0.475		398	492	643	0.71	188	057	772	0.34	860	214
8			881	506	9292	85650		748	067	097	1233	511	936	946	6477	237	413
			9	2	638	2		7	8	4	755	71	7	7	501	7	9
			0.16	0.19				0.23	0.06	-0.0		0.01	0.91	-0.0		-0.0	
cg27	Naringenin chalcone	grey	015	896	0.01	0.896		046	264	164	0.89	363	349	155	0.90	302	0.80
7			043	059	6251	94905		944	302	793	5514	080	885	622	1299	024	976
			7	6	837	1		9	7	5	442	3	3	08	572	5	234
			0.15	0.20				0.28	0.02	0.09		0.23	0.05	0.00		-0.1	0.31
cg61	6-Pentyl-2H-pyran-2-one	grey	859	340	-0.02	0.829		315	123	965	0.42	824	405	112	0.99	255	517
3			842	534	6964	83570		090	711	100	5982	561	775	723	2832	440	696
				7	266	1		2	6	1	743	6	1	6	909	73	1
cg45	SM (d27:1/16:0)	grey	0.15	0.20	0.02	0.841		0.17	0.16	-0.0	0.76	0.04	0.72	-0.0	0.72	-0.0	0.82

1			836	407	5139	19541	319	430	378	3054	358	825	445	2527	274	702
			725	335	622	5	884	874	179	721	027	455	368	741	162	701
			8	3			6		15		3	9	94		54	3
			0.15	0.20			0.12	0.32	-0.0		0.00	0.93	0.00		0.01	0.87
cg15	2,3,4-Trihydroxybenzoic		807	492	0.08	0.497	369	240	032	0.97	996	668	790	0.94	936	736
2	acid	grey	473	089	4990	45530	669	735	717	9200	749	977	075	9797	210	734
			9	9	036	2	9	7	26	037	1	8	5	868	1	1
			0.15	0.20			0.08	0.48	0.14		0.05	0.65	0.02		-0.0	0.91
cg52	2-chloro-6-(3,5-dimethyl-1		774	588	0.12	0.317	692	767	996	0.22	628	354	587	0.83	129	759
8	H-pyrazol-1-yl)benzonitri	grey	397	226	5062	05242	522	820	260	9427	016	545	654	6603	824	881
	le		4	5	309	5	4	4	1	643	1	4	1	547	22	1
			-0.1	0.20			-0.0	0.81	-0.0		-0.0		-0.0		-0.0	0.50
cg45	N-Lauroylsarcosine	grey	572	735	-0.10	0.399	300	044	753	0.54	623	0.61	691	0.58	838	304
			393	507	5345	88566	925	182	696	7531	720	882	342	1237	921	728
			6	8	585	8	28	2	41	497	12	529	12	232	1	7
cg35	DL-Stachydrine	grey	0.15	0.20	0.05	0.632	0.18	0.12	0.03	0.77	0.00	0.94	0.04	0.72	-0.0	0.82
4			676	874	9869	99425	926	800	651	0986	821	779	473	1352	279	360

			583	392	369	7	685	262	586	092	560	999	346	867	678	243
			5	4			7	1	7		8	6			26	1
			-0.1	0.21			-0.0	0.80	-0.0		-0.0	0.63	-0.0		-0.0	0.46
					-0.10	0.399				0.55				0.58		
cg73	N-Tetradecanamide	grey	560	098	5331	94699	308	585	736	6683	596	411	688	2992	917	392
			061	566			355	161	590		727	284	140		147	220
					953	5				284				972		
			95	9			46	6	93		97	5	79		61	1
			0.15	0.21			0.14	0.24	0.01		0.10	0.40	-0.0		-0.0	0.86
					0.09	0.444				0.90				0.98		
cg36	SM (d30:1/13:0)	grey	569	190	5651	87707	650	045	437	8823	335	888	018	8339	211	641
1			498	896			998	188	061		725	921	339		064	637
					528	1				493				674		
			4	4			8	6	4		5	5	7		57	9
			0.15	0.21			0.22	0.07	0.06		0.08	0.52	0.07		0.00	0.99
					0.10	0.380				0.57				0.55		
cg56	Cyclamic acid	grey	514	353	9817	06445	143	397	959	8699	024	183	455	1903	046	705
			990	296			043	133	763		794	763	081	29	325	452
					897	4				933						
			1	9			9	3	1		9	1	9		8	6
			-0.1	0.21	-0.10	0.381	0.01	0.92	-0.0	0.76	-0.0	0.56	-0.1	0.12	-0.1	0.33
cg55	4-Phenyl-3-buten-2-one	grey	539	704	9431	75375	110	949	369	8085	727	155	897	7060	200	678
7			804	663	399	4	261	728	916	25	542	364	271	583	998	565

			81	9			1	4	29		49	2	95		06	9
			-0.1	0.21			-0.0	0.95	-0.0		-0.0	0.65	-0.1		0.05	0.66
cg21					-0.13	0.274				0.68				0.34		
8	Dulcitol	grey	533	892	6417	74526	073	354	509	4411	559	569	181	4883	345	989
			602	657	309	7	104	437	719	716	071	632	165	079	620	824
			55	6			56	4	4		61	2	46		7	3
			-0.1	0.22			0.09	0.45	-0.0		-0.0	0.42	-0.0		-0.0	0.47
cg63	(2R,3S,4S,5R,6R)-2-(hydro				-0.17	0.170				0.54				0.61		
5	xymethyl)-6-(propan-2-yl	grey	526	120	0629	75330	437	098	762	2940	992	768	631	4484	899	263
	oxy)oxane-3,4,5-triol		131	620	936	6	882	600	329	332	856	965	435	441	427	708
			54	3			1	6	58		2	8	75		78	7
			-0.1	0.22			-0.5		-0.1		-0.0	0.70	0.00		-0.0	0.91
cg70	1-[(3,5-dimethylisoxazol-4				0.08	0.476		3.35		0.37				0.95		
2	-yl)sulfonyl]piperidine	grey	523	211	9156	52988	798	E-0	112	3935	467	944	768	1161	131	626
			153	951	951	3	810	7	289	018	320	436	595	016	934	388
			45	9			06		98		08	7	8		93	9
			0.15	0.22			0.06	0.59	-0.0		-0.0	0.74	-0.0		-0.0	0.81
cg61					0.03	0.754				0.96				0.98		
2	T-2 Triol	grey	230	214	9235	44789	721	178	055	4450	408	496	021	6395	297	247
			785	251	372	1	745	539	929	629	032	240	397	549	636	537
			8	4			1	3	2		32	6	74		87	5

cg18 4	2'-Deoxyinosine 5'-monophosphate	grey	0.15	0.22			0.07	0.54	0.00		0.01	0.92		0.04				
			151	459	0.21	0.086			558	637	433	0.97	173	548	0.02	0.81	0.69	
			372	099	2516	68835			598	919	271	2457	663	231	955	3785	987	087
			8	9	245	4			8	5	4	111	3	7	198	221	202	45
cg67 0	Deoxycorticosterone 21-glucoside	grey	0.15	0.22					0.67		-0.0	0.88	0.13		0.03	0.79		
			096	628	0.09	0.461	0.05		949	0.02	0.84	179	613	256	0.28	194	898	
			686	802	2228	41321	181		679	411	7596	678	688	404	8658	942	259	
			1	5	25	3	099		8	374	63	64	5	9	142	2	3	
cg15 9	LPE 18:0	grey	0.15	0.22			0.00				-0.0	0.84	0.05		0.25	0.03		
			090	646	0.12	0.306	291		0.98	0.10	0.41	238	932	573	0.65	745	689	
			890	840	7834	35673	399		147	159	6966	362	974	319	6700	785	210	
			1	7	864	2	4		389	497	77	59	2	3	451	7	1	
cg75 8	TLK	grey	0.15	0.22			0.08	0.49	-0.0		-0.0	0.94	0.02		0.01	0.90		
			012	891	0.05	0.686	558		441	169	0.89	083	668	309	0.85	476	633	
			670	254	0578	72265	897		843	462	2571	911	613	464	3965	514	146	
			7	1	201	2	8		4	64	309	68	4	8	214	2	4	
cg27	Ornithine	grey	-0.1	0.23	0.15	0.228	-0.3	0.00	-0.0	0.99	-0.0	0.63	0.17	0.17	0.17	0.15		

4			495	078	0112	95806	788	170	003	7826	586	992	024	1737	558	848
			319	316	194	3	333	887	418	163	536	538	379	777	528	387
			66	2			36		96		41	4	3		8	
			0.14	0.23			0.24		-0.0		-0.0	0.87	-0.0		-0.0	0.72
cg56	Hesperetin	grey	933	140	-0.00	0.948	101	056	0.96		204	060	397	0.75	436	760
3			633	079	8040	90860	534	124	3800		392	244	519	1318	881	789
			2	6	892	4	5	183	534		15	2	39	609	68	6
			0.14	0.23			0.10	0.38	-0.0		-0.0	0.83	-0.0		0.00	0.95
cg57	Tolterodine	grey	871	337	0.01	0.910	901	359	317	0.80	258	698	072	0.95	705	516
3			278	704	4115	43708	128	508	463	0233	146	915	582	3875	554	254
			1	8	231	9	2	7	27	921	24	5	55	729	7	4
			0.14	0.23			-0.1	0.26	0.38		0.07		0.24		0.19	0.11
cg38	DL-o-Tyrosine	grey	837	445	0.35	0.003	406	007	260	0.00	099	057	084	0.05	387	881
1			273	967	2705	67699	254	018	121	1522	807	106	193	1414	350	144
			6	9	852	7	17	1	4	058	1	334	1	545	4	9
cg15	N-[4-(diethylamino)phen	grey	-0.1	0.23	-0.09	0.438	-0.0	0.79	-0.0	0.60	-0.0	0.68	-0.0	0.55	-0.0	0.55
0	yl]-N'-phenylurea		474	739	7075	09710	332	070	644	7227	511	348	743	2981	742	347



			558	628	483	5	942	988	388	009	293	867	494	024	563	960
			06	2			01	6	09		46	6	43		45	9
			-0.1	0.24			-0.0	0.49	-0.0		-0.0	0.74	-0.0		-0.0	0.78
cg12	2-[6-(1H-benzo[d]imidazo				-0.08					0.82				0.61		
6	l-2-yl)-2-pyridyl]-1H-benz	grey	459	243		0.520	846	897	284		415	063	636		350	013
	o[d]imidazole		000	675		76336	918	071	975		205	508	405		188	382
			24	1	48		72	5	97		58	2	09	619	86	1
			-0.1	0.24			-0.0	0.64	-0.0		-0.0	0.54	-0.0		-0.0	0.59
cg46	N-Methyloctan-1-amine	grey	453	422	-0.18		0.129	569	951	679		764	203	621	0.62	662
8			539	318	8351	89184	799	795	447	7772	035	552	596	0022	391	187
			64	7	361		19	5	78	724	13	9	43	377	67	5
			0.14	0.24			0.12	0.32	0.21		0.02	0.82	0.11		-0.0	0.66
cg98	1-[6-(benzyloxy)-3-(tert-b				0.05	0.658				0.07				0.37		
	utyl)-2-hydroxyphenyl]et	grey	478	609		27297	246	726	936		775	493	065	6410	550	054
	han-1-one		371	837	5460	5	916	974	126	6781	376	112	748	297	687	084
			2	8	958		2	1	4	694	1	4	1		95	6
cg39			0.14	0.25	0.09		0.07	0.57	0.01	0.89	0.00	0.97	0.01	0.87	-0.0	0.98
2	PE (18:0e/18:3)	grey	242	397	2309	0.461	098	114	601	8415	463	051	991	3869	018	823
			060	401	211	0183	224	937	939	098	897	104	889	249	511	065

			2	5			5	2	2		8	3	2		17	7		
cg40	3-Methoxytyramine	grey	0.14	0.25			0.23		-0.0		-0.0	0.92	-0.0		-0.0	0.75		
9					-0.01			0.05		0.83				0.74				
					225	452	0.900	344		262		118	499	399		394	309	
					739	420	5748		923		4369		137	438	729		588	356
									417		742				09			
			1	6			5		43		05	1	31		57	4		
cg15	Phe-Phe	grey	-0.1	0.25			-0.5		-0.1		-0.1	0.37	0.03		0.03	0.80		
4					0.26	0.030		2.29		0.24				0.76				
					420	513		864		463		115	245	749		165	079	
					763	528	7104	15361		E-0		1091			5007			
							789	2		7		978			778		534	464
			98	7			02		06		04	9	8		6	2		
cg63	4-[(2-thienylmethylidene)amino]benzoic acid	grey	0.14	0.25			0.21	0.08			0.00	0.93	0.04		-0.0	0.97		
1					0.07	0.542		0.06		0.62				0.72				
					099	880		077	936		042	9824	969	842	418		046	029
					576	450	6327	43875		141	822		450	030	149		725	748
							488	4		9	1		712	846		582		
			8	5			9	1			2	7	6		88	8		
cg41	Silibinin	grey	0.14	0.25			0.00	0.96	-0.0		0.01	0.90			0.02	0.82		
1					0.25	0.042		0.91		0.91		0.01	0.90		0.98			
					078	950		535	596	138		576	003	0.00	0.98		784	438
					958	860	0562	43986		428	652	273		190	7898		200	333
							567	1		2	7	49		339	332		6	2
			9	9			2	7	49		7	5			6	2		

cg30 9	Kaempferol	grey	0.14	0.25			0.13	0.26	0.07		0.01	0.91	0.07	0.01	0.88		
			073	970	0.05	0.656	819	848	251	0.56	287	828	438	0.55	840	336	
			158	692	5711	82346	270	791	952	2820	422	321	917	2768	899	072	
					887	9				329					316		
			6	2			6	5	6		2	2	3		3	6	
cg33 9	MQH	grey	0.14				0.07	0.55	0.07			0.84	-0.0		-0.0		
			025	0.26	0.07	0.552	333	844	977	0.52	0.02		0.83		0.99		
			286	134	4416	62064	049	967	386	4307	450	513	262	4388	001	900	
				76	759	7				783	813	456	322	869	558	937	
			4				1	1	6			5	7		04		
cg45 8	2-cyano-N-(3-oxo-1,3-dihydro-2-benzofuran-5-yl)benzenesulfonamide	grey	0.13	0.26			0.15	0.20			0.12	0.31	0.09		0.01		
			961	355	0.10	0.381	645	966		0.99	556	510	581	0.44	820	0.88	
			064	960	9554	21537	151	943	017	8884	179	810	670	4087	363	465	
				1	464	3	9	7	542	649	6	7	3	63	1	296	
cg63 2	2-(5-methyl-2-pyridyl)-2H-isoindole-1-carbonitrile	grey	0.13	0.26			-0.0	0.74	0.08		0.06		0.24		0.11	0.34	
			790	949	0.30	0.012	403	749	820	0.48	720	0.59	718	0.04	783	606	
			508	509	5328	66879	839	514	827	1252	232	186	461	5399	010	251	
			4	2	195	5	94	8	4	154	6	897	5	266	6	6	
cg48	2-Ketohexanoic acid	grey	-0.1	0.27	0.10	0.387	-0.5	2.50	0.14	0.25	-0.0	0.60	0.22	0.07	0.23	0.05	

			374	101	8220	07443	427	E-0	329	1025	655	122	045	5291	376	888
			717	746	714	7	769	6	941	387	150	532	108	093	005	454
				3			41		7		32	3	1		4	6
			-0.1	0.27			-0.0	0.74	-0.0		-0.0	0.92	-0.0		-0.0	
cg40	PE (18:0e/18:2)	grey			-0.06	0.597				0.94				0.80		0.99
			365	437			414	105	086		118	506	309		014	
2			226	126	6118	87088	506	661	236	5211	030	195	743	4994	230	095
					61	2				249				619		206
			61	6			24	4	55		31	5	85		66	
			0.13	0.27			0.09	0.46	0.09		0.25	0.04	0.20		0.01	0.92
cg45	Pyridoxal	grey			0.18	0.126				0.45				0.10		
			587	668			196	268	446		224	102	205		165	597
2			312	253	9854	80069	679	980	741	0559	901	308	028	3752	927	212
					649	4				274				065		
			7	8			4	3	3		6	7	6		1	1
			-0.1	0.27			-0.1	0.32	0.05		-0.0	0.86	-0.0		0.09	0.45
cg23	Eicosapentaenoic acid	grey			-0.13	0.287				0.63				0.58		
			355	794			236	248	967		213	475	681		282	853
4			194	663	2835	66145	765	693	288	4112	713	526	157	6831	013	035
					952	5				324				296		
			07	2			15	7	9		93	5	43		7	9
cg34	Arecoline	grey	0.13	0.28	0.13	0.284	0.13	0.26	0.05	0.64	0.01	0.89	0.05	0.66	0.03	0.78
7			453	146	3822	06447	924	482	750	6486	614	761	377	8063	472	191

			994	696	427	9	402	798	775	556	675	174	172	377	770	667
			2	7				1	4		9	1	6		3	4
				0.28			0.28	0.01	-0.0		-0.0	0.82	-0.0		0.01	0.90
cg48	2-piperidinobenzoic acid	grey	0.13	381	-0.01	0.917	966	831	306	0.80	271	879	254	0.83	475	640
8			388	961	2970	67394	277	992	928	6732	312	784	499	9260	308	761
			988	7	543	7	4	3	73	516	42	8	72	917	4	7
				0.28			-0.0	0.50	-0.1		-0.0	0.49	-0.1		-0.0	0.46
cg75	Mupirocin	grey	335	499	-0.01	0.909	831	700	130	0.36	859	277	438	0.24	907	878
4			664	498	4235	67923	194	173	313	6193	131	894	904	9055	233	737
			49	1	17	3	95	7	53	505	22	8	59	476	36	8
			0.13	0.29			0.16	0.19	0.10		0.04	0.69	0.04		0.01	0.91
cg30	Cortisone	grey	214	018	0.00	0.969	129	572	173	0.41	876	741	199	0.73	322	606
5			790	796	4780	61188	568	550	449	6323	353	000	233	7793	564	056
			2	7	492	7	9	3	4	922	4	5	9	376	4	6
cg44	4-(1H-pyrazol-1-yl)-N,N-		-0.1	0.29	-0.03	0.763	-0.1	0.35	-0.0	0.85	-0.0	0.69	-0.0	0.80	-0.0	0.88
6	bis(2-pyridinylmethyl)be	grey	313	316	7788	23491	152	697	224	7789	489	634	314	2231	178	658
	nzenesulfonamide		411	895	289	7	069	981	833	686	440	395	223	01	962	750

			28	2			87	1	8		91	5	6		81	6
			0.13	0.29			0.16	0.17	0.10		0.02	0.81	0.02		0.05	0.68
cg15	5-[4-(phenylsulfonyl)phenyl]-1H-pyrazole	grey	120	366	0.10	0.387	936	400	837	0.38	890	778	886	0.81	104	400
7			682	712	8032	90404	134	312	045	6413	582	614	332	8049	086	749
			7	7	837	9	9	1	4	98	9	7	3	508	2	3
			0.13	0.29			0.09	0.42	-0.0		-0.0	0.98	0.02		0.01	0.89
cg85	PS (18:0/18:1)	grey	114	391	0.18	0.142	888	956	324	0.79	021	602	396	0.84	662	461
			104	132	2318	87438	534	403	117	6135	983	304	248	8541	245	226
			9	6	106	3	8	1	51	936	69	8	3	273	1	9
			0.13	0.29			0.16	0.18	0.09		-0.0	0.93	0.11		0.01	
cg80	3-(5,7-dimethoxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)propanoic acid	grey	050	626	0.12	0.332	474	620	960	0.42	109	076	503	0.35	369	0.91
7			801	825	1261	10005	494	990	157	6213	028	275	816	7689	892	306
			1	4	114	9	1	5	4	415	33	5	5	616	8	82
			0.13	0.29			0.21	0.08	-0.0		-0.0	0.88	-0.0		-0.0	0.80
cg79	Neohesperidin	grey	029	707	-0.01	0.882	258	657	305	0.80	174	909	434	0.72	313	294
			326	061	8599	16416	933	749	226	7783	984	266	193	9219	061	761
			5		193	4	6	3	25	986	31	7	19	58	63	3

cg60 2	2,5-bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-3,4-dimethylxolan-3-ol	grey	0.13	0.29	0.05	0.647	0.06	0.58	0.07	0.57	0.01	0.89	-0.0	0.81	-0.0	0.93	
			020	740	7276	81415	890	246	110	0487	706	179	288	7935	100	603	
			457	239	467	7	971	823	400	595	891	846	817	487	704	704	
			1				2	1	4		1	1	25		72		
cg13 5	N'1-[1-(2-hydroxyphenyl)ethylidene]-3-methoxybenzene-1-carbohydrazide	grey	0.12	0.29			-0.1	0.41			0.07	0.53	0.02		0.23		
			965	946	0.18	0.131	029	081		0.11	0.37	686	959	519	0.84	275	0.06
			383	804	7367	94512	351	585		211	0137	416	543	287	0863	184	001
			4	7	73	9	01	8		017	917	4	4	4	418	9	616
cg53	5,7-Dihydroxy-2-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)chroman-4-one	grey	0.12	0.30			0.21		-0.0		-0.0	0.89	-0.0		-0.0	0.75	
			931	076	-0.02	0.855	969	0.07		0.79	168	349	401	0.74	391	504	
			036	102	2802	79091	879	631		5599	003	067	147	9122	365	680	
			4	8	779	6	8	754		002	86	9	88	91	79	8	
cg39 3	SM (d24:0/17:0)	grey	0.12	0.30			0.13	0.26	-0.0		0.01		-0.0		-0.0	0.81	
			910	155	0.01	0.887	897	576	510	0.68	049	0.93	343	0.78	288	842	
			030	356	7715	72593	272	920	998	3661	858	332	068	4495	029	333	
			6	7	463	7	6	5	56	569	5	393	87	224	93	2	
cg44	N-Acetylsphingosine	grey	0.12	0.30	0.18	0.134	0.06	0.62	-0.0	0.85	-0.0	0.99	0.03	0.79	0.01	0.92	

5			897	202	6074	68264	078	781	230	4546	012	207	304	2227	199	386		
			547	520	171	3	081	839	017	033	471	055	727	191	162	807		
			1	9			9	9	81		43	2	8		7	6		
			0.12	0.30			0.32		-0.0		0.00	0.93	-0.0		-0.0	0.75		
cg39	6-(3-hydroxybutan-2-yl)-5		875	285	-0.03	0.774		0.00		0.70				0.69				
4	-(hydroxymethyl)-4-methoxy-2H-pyran-2-one	grey	668	296	5957	39432		988	786	2038		962	884	492	4292	396	181	
			4	7	544	2		9	734	752		797	207	918	204	703	239	
												5	2	77		83	8	
			-0.1	0.30			-0.0	0.56	-0.0		-0.0	0.64	-0.0		-0.0	0.73		
cg53	Narasin		273	808	-0.14	0.261		722	428	515		0.68		0.76				
0		grey	819	760	0127	77774		486	370	490		1029	581	304	375	4734	422	609
			99	7	691	5		65	3	47		77	089	070	418	65	737	979
												7	1	03		83	6	
			-0.1	0.31			0.09		-0.0		-0.0	0.62	-0.0		-0.0	0.51		
cg67	Enrofloxacin		267	036	-0.14	0.230		637	0.44	0.64				0.73				
2		grey	875	930	9663	36921		441	142	575		607	820	423	5712	808	861	
			21	2	287	2		9	785	203		132	151	382	233	677	727	
												46	8	19		11	5	
cg18	PE (16:1e/20:4)		0.12	0.31	0.08	0.505	0.14	0.23	0.00	0.94	0.11	0.35	0.06	0.61	0.04	0.71		
6		grey	668	076	3339	87232	811	529	886	3655	532	646	343	2833	504	948		



			386	826	841		262	016	893	389	933	595	754	988	592	658
			5	4			4	3	8		2	9	8		5	1
cg58	4-(2,3-dihydro-1,4-benzod		-0.1	0.31			-0.1	0.18	-0.0		-0.0	0.99	-0.0		-0.0	0.85
	ioxin-6-yl)-1,2-diphenylb	grey	258	418	-0.04	0.740	640	816	307	0.80	006	607	368	0.76	221	968
2	ut-2-ene-1,4-dione		002	246	1545	48328	265	358	104	6623	173	489	631	8868	813	062
			83	7	745	1	92	7	61	913	33	2	23	472	43	5
			0.12	0.31			0.12	0.32	0.00		0.10		0.25		-0.0	0.63
cg26	Nicotinamide	grey	556	511	0.11	0.357	321	429	978	0.93	246	0.41	812	0.03	603	031
4			102	108	5018	77193	978	097	569	7842	351	297	794	6386	399	962
			8	9	6	6	2	4	9	162	3	432	2	71	73	1
			-0.1	0.31			-0.1	0.34	-0.0		-0.1	0.32	-0.0		-0.0	0.50
cg80	4-acetyl-4-(ethoxycarbony		245	914	-0.13	0.282	176	663	931	0.45	239	156	639	0.61	835	499
5	l)heptanedioic acid	grey	277	161	4158	84417	905	824	539	6909	118	004	014	0233	115	315
			86	5	97	5	04	7	19		11	4	19	57	39	8
			0.12	0.32	0.08	0.522	0.15	0.22	-0.0	0.97	0.12	0.32	0.08	0.50	0.01	0.93
cg81	SM (d14:1/20:0)	grey	306	491	0147	35862	087	658	034	8013	383	187	352	4941	007	603
			241	404	863	9	238	210	584	321	258	195	159	691	121	231

			3	4			6	1	35		2	9	5		8	5			
			0.12	0.32			0.02	0.82	-0.0		-0.0	0.70	0.09		0.00	0.95			
cg65	Stercobilin	grey			0.04	0.698				0.94				0.43					
9				293	540			792	385	089		478	274	741		754	204		
								8599	37977			2898				6493			
					958	090			687	656	882		621	060	413		713	209	
							369	8				628				258			
			1	3			6	5	54		61	4	2		5	6			
			-0.1	0.32			-0.0	0.83	0.16			0.61	-0.0		-0.1	0.28			
cg15	albiflorin	grey			-0.02	0.849				0.17	0.06			0.78					
5				222	813			267	146	944			642	342		328	757		
								3741	92465			3782	279			4573			
					515	634			029	052	691		513	766	895	940		592	633
							036	8								884			
			99	8			47	4	5			9	56		01	8			
			0.12	0.32			0.24	0.04	-0.0		-0.0	0.77	-0.0		0.00	0.93			
cg60	Cantharidin	grey			-0.00	0.985				0.74				0.82					
3				220	832			283	946	402		361	313	276		978	782		
								2315	28038			8135				5587			
					505	191			253	033	780		629	964	480		837	521	
							192	1				324				746			
			9	8			1	3	97		99	3	02		2	3			
			-0.1	0.33			-0.3	0.00	-0.0		-0.0	0.81	0.06		0.03	0.79			
cg15	Panthenol	grey			-0.02	0.830				0.60				0.63					
					215	084			626	277	648		286	954	029		287	329	
							6788	92981				4684				0570			
					734	702			053	081	940		220	471	579		378	372	
							288	5				92				524			
			2	8			47	9	85		57	6	1		8	4			

cg80 3	Estrone	grey	-0.1	0.33			-0.0	0.82	0.02		-0.0	0.90	-0.0		-0.0	0.97			
			206	457	-0.06	0.596			280	302	157	0.86	153	268	563	0.65	043	236	
					6390	36080						3485				3411			
			455	859			606	625	397			509	433	056	034		469	645	
			43	4	815	2			78	3	2		95	7	66		81	6	
cg36 9	SM (d14:0/28:0)	grey	0.12	0.33			0.18	0.14	-0.0		-0.0	0.95	-0.0		-0.0	0.63			
					-0.04	0.733						0.75			0.71				
			012	669			304	125	398			0639	077	101	460		597	363	
			298	172	2703	51395			931	109	640		092	330	800		567	524	
			5	9	909	6			1	8	65	892	33	1	12	885	1	2	
cg11 2	2-Methylglutaric acid	grey	0.11	0.34			0.10	0.39	0.04		0.11	0.34	-0.0		0.03	0.76			
					0.12	0.315						0.72			0.89				
			862	277			614	630	455			2428	888	173	161		728	632	
			917	856	5401	73131			391	367	356		295	965	586		117	138	
			2	1	482	4			7	3	4	08	6	6	37	827	2	1	
cg80 2	1H-indole-2,3-dione 3-[N-(5,6-diphenyl-1,2,4-t riazin-3-yl)hydrazone]	grey	0.11	0.34			0.43	0.00	-0.1		0.22	0.06	-0.1		-0.1	0.25			
					-0.15	0.224						0.28			0.17				
			768	666			879	022	324			8983	946	382	676		426	308	
			320	836	1632	22367			522	828	755		495	816	958		860	082	
			6	2	479	2			9	6	26	122	4	7	97	776	74	4	
cg11	8-iso-15-keto	grey	-0.1	0.34	-0.02	0.817	-0.1	0.18	-0.0	0.83	0.00	0.97	-0.0	0.78	-0.0	0.91			



			719	996	725	9	892	786	353	371	984	767	713	642	05	865
			8	6				7	02		13	8	46			3
cg19	5-(tert-butyl)-3-[(2-cyanoacetyl)amino]thiophene-2-carboxamide	grey	0.11	0.36			0.17	0.17	0.06		0.02	0.83	0.02		0.03	0.79
9			280	716	0.08	0.493	091	002	861	0.58	541	944	477	0.84	296	271
			356	646	5709	80798	721	356	371	4093	972	942	505	3469	840	203
			8	7	604	9	6	9	8	065	4	1	3	073	2	4
			-0.1				-0.0	0.99	-0.0		-0.0	0.82	-0.0		-0.0	0.98
cg22	Sulfoacetic acid	grey	124	0.36	-0.07	0.549	003	772	661	0.59	270	944	648	0.60	019	791
0			839	853	5060	17764	584	074	160	7884	278	029	267	5060	005	607
			51	433	956	2	76	4	77	946	76	4	93	358	99	4
			-0.1	0.36			0.09	0.42	-0.0		-0.0	0.59	-0.0		-0.0	0.70
cg19	Lauric acid	grey	121	985	-0.12	0.309	984	509	487	0.69	658	921	431	0.73	481	098
3			751	890	7018	48106	157	400	946	7225	770	235	370	0913	593	144
			34	7	609	1	3	4	93	998	54	6	18	158	55	7
			-0.1	0.37	-0.23	0.055	-0.0	0.82	-0.0	0.71	-0.0	0.49	0.10	0.39	-0.0	0.42
cg79	23-Norcholic acid	grey	113	353	6570	82133	275	619	460	3343	850	696	743	0565	991	843
9			224	102	315	2	504	341	764	105	864	589	167	708	260	644

			93	2			67	4	48		29	6	9		26	
cg57	3-(2,3-dihydroxy-5-methy		-0.1	0.37			-0.0	0.63	-0.0		-0.0	0.71	-0.0		-0.0	0.78
1	lphenoxy)-5-methylbenze	grey	106	661	-0.10	0.386	600	212	423	0.73	458	485	570	0.64	336	881
	ne-1,2-diol		096	802	8444	08545	228	171	442	5675	230	234	567	9076	025	623
			23	4	994	8	02	6	93	702	05	1	12	572	46	8
cg77	YLH	grey	-0.1	0.37	-0.09	0.440	0.01	0.91	0.06	0.61	-0.0	0.56	-0.0	0.75	-0.0	0.66
3			104	713	6531	67818	260	996	372	1216	716	759	384	9134	549	106
			902	626	952	3	911	033	604	154	374	233	63	132	783	429
			94				7	5	2		71	6			55	
cg33	N-Phenylacetylglutamine	grey	0.10	0.38	0.21	0.086	0.06	0.57	0.16	0.19	0.07	0.55	0.03	0.76	0.13	0.29
			918	284	2397	86841	982	744	014	8977	479	057	769	3828	098	449
			135	903	691	1	732	422	462	111	966	290	073	36	362	629
			6				1	6	5		5	3	8		5	9
cg12	L-Threonic acid Calcium	grey	-0.1	0.38	-0.09	0.426	-0.0	0.76	-0.0	0.65	-0.0	0.61	-0.0	0.72	-0.0	0.73
3	Salt		089	390	9518	60002	371	722	559	5674	629	540	434	8786	418	892
			399	842	77	4	328	474	110	107	790	895	915	297	042	578
			1	8			58	5	11		53		76		66	7

cg65 5	3-morpholino-5,6-diphen ylpyridazine-4-carbonitril e	grey	0.10	0.38			0.07	0.52	0.05		0.00	0.99	-0.0	-0.0	0.76			
			804	782	0.02	0.837			935	647	649	0.65	048	693	574	0.64	371	688
			968	960	5760	32493			948	163	623	2300	250	215	595	6762	886	481
			7	4	712	8			6	7	1	795	4	6	83	969	62	3
cg62 2	N-(1,3-benzodioxol-4-ylm ethyl)-6,7-dimethoxyquin azolin-4-amine	grey		0.38			0.04	0.69	0.06		0.01	0.93	-0.0	-0.0	0.96			
			0.10	788	0.04	0.730			983	108	703	0.59	066	228	379	0.76	048	927
			803	684	3181	64716			593	695	133	2814	204	821	306	2369	329	881
			673	9	342	2			2	1	2	182	6	3	58	076	14	7
cg54 1	trans-3-Hydroxycotinine	grey	0.10	0.38			0.23	0.05			-0.0	0.85	-0.0	-0.0	0.58			
			797	818	-0.03				848	381	0.14	0.23	222	926	583	0.64	691	092
			010	128	2515	0.795	848	381	739	7595			479	344	793	1493	910	572
			7	6	171	49952	442	009	39	455			67	9	12	673	57	1
cg46 0	Tetracycline	grey	-0.1	0.38			-0.1	0.18	-0.0		0.00	0.99	-0.0	-0.0	0.96			
			079	835	-0.01	0.899			653	468	191	0.87	066	580	169	0.89	050	796
			306	577	5790	86105			077	939	061	8976	045	071	349	2642	389	978
			4	1	185	5			89	7	53	144	6	5	38	685	51	3
cg82	Valylproline	grey	-0.1	0.39	0.11	0.367	-0.3	0.00	-0.0	0.72	-0.0	0.57	0.07	0.54	-0.0	0.67		

0			064	501	2697	62143	377	554	439	5996	693	988	675	0184	526	440
			312	927	18	2	666	362	572	251	808	608	289	32	834	044
			1	8			96	7	07		73	8	9		15	1
			0.10	0.39			0.23	0.05	0.05		-0.0	0.68	-0.0		0.00	0.98
cg72	3-[(4-chlorobenzyl)thio]-4		554	897	-0.00	0.976	710	525	907	0.63	503	800	533	0.67	267	299
5	-methyl-5-undecyl-4H-1,2	grey	744	814	3683	58411	216	645	980	7492	595	723	763	0362	452	609
	,4-triazole		9	5	306	4	4	9	7	188	44	2	97	675	8	4
			-0.1	0.39			0.02	0.81	0.05		0.10	0.42	-0.0		-0.0	
cg62			054	923	0.05	0.651	870	901	153	0.68	040	245	387	0.75	568	0.64
3	ACar 10:1	grey	902	522	6592	74793	778	334	290	1124	863	575	715	7261	983	998
			38	4	258	4	7	4	2	298	6	7	3	129	48	693
			0.10	0.40			0.06	0.59	0.02		-0.0		-0.0		-0.0	0.69
cg34	2-Amino-1,3,4-octadecane		468	285	0.18	0.139	588	917	785	0.82	801	0.52	768	0.53	485	849
4	triol	grey	789	085	4014	12859	394	406	956	4274	923	212	317	9767	800	377
			5	2	959	9	6	3	7	332	5	702	31	056	76	9
			-0.1	0.40	0.16	0.181	-0.5	1.28	-0.0	0.68	0.00	0.99	0.03	0.76	0.20	0.09
cg80	Cinnamoylglycine	grey	034	841	6629	15411	089	E-0	512	2948	042	732	807	1495	880	246



			609	665	517	6	818	5	215	215	11	256	434	526	563	503
			75	6			23		47			9	3			5
				0.41			0.00	0.99	-0.0		-0.0	0.83	-0.0		-0.0	0.78
cg42			0.10		0.17	0.162				0.61				0.61		
	SM (d17:1/19:0)	grey	288	103	3741	97180	044	715	633	3124	267	105	638	0624	345	290
5				557			814	059	857		684	293	316		668	203
			703		005	5				54				502		
				9			7	9	71		88	9	29		49	3
			-0.1	0.41			0.00	0.95	0.00		0.02	0.84	-0.0		-0.0	0.73
cg43					-0.07	0.526				0.93				0.98		
	Homogentisic Acid	grey	023	346	9320	67685	720	422	953	9463	441	571	028	2172	430	120
0			569	279			365	231	002		490	640	041		888	247
					231	5				092				154		
			87	4			7	4	5		6	4	45		13	8
			-0.1	0.41			-0.5		-0.0		-0.0	0.91	0.03		0.21	0.08
					0.16	0.177		1.56		0.70				0.79		
cg77	Indole-3-lactic acid	grey	011	879	8156	13011	045	E-0	480	1756	129	775	252	5454	675	043
			979	913			106		284		574	666	242	87	990	470
					915	4		5		108						
			5	4			27		51		65	2	8		8	6
cg78	N1-(4-cyclohexylphenyl)-		-0.1	0.41	-0.05	0.635	-0.0	0.94	-0.0	0.59	-0.0	0.86	-0.0	0.79	0.00	0.94
	2-[(4-methylphenyl)thio]a	grey	009	992	9471	26085	081	831	661	7442	213	475	324	5622	833	706
7	cetamide		548	326	204	7	343	552	957	591	715	447	952	322	201	144

			76	8			58	9	82		2		14		2	4
			-0.1	0.42			-0.0	0.73	-0.0		0.00	0.97	-0.0		-0.0	0.81
cg42	5-hydroxy-4-methoxy-5,6-		000	416	0.02	0.859	426	379	299	0.81	384	556	402	0.74	291	609
4	dihydro-2H-pyran-2-one	grey	410	468	2155	84547	571	510	860	1100	394	321	299	8426	780	979
			9	5	018	2	19	8	36	234	2	2	44	478	83	8
			0.09	0.43			0.07	0.57			0.01	0.88			0.02	0.82
cg25	Urocanic acid		845	158	0.15	0.210	091	151		0.02	0.82		0.26	0.03	705	924
9		grey	499	447	6034	90270	438	834		744	6834		679	0351	918	569
			5		207	3	8	3		729	228		634	855	4	1
			0.09	0.43			0.29	0.01	0.04		0.22		-0.0		-0.1	0.31
cg76	N1-(6-methyl-4-oxo-3,4-di-		834	211	0.05	0.671	426	647	525	0.71	155	0.07	948	0.44	266	077
4	hydroquinazolin-2-yl)-4-n	grey	231	435	3154	65683	655	048	939	8212	666	380	705	8620	809	947
	itrobenzamide		4	1	114	5	4	3	7	496	2	259	27	362	54	2
			-0.0	0.43			-0.0	0.76	-0.0		-0.0	0.70	-0.0		-0.0	0.72
cg59	1-(4-benzylpiperazino)-2-(		982	240	-0.12	0.309	367	966	494	0.69	470	769	390	0.75	441	456
0	pyridin-2-ylamino)propa	grey	805	486	6999	55586	328	276	972	3081	268	312	283	5702	970	047
	n-1-one		7	7	132	3	39	5	69	521	81	1	96	827	54	9

cg72 8	3,4-dihydro-2H,6H-[1,3]thiazino[2,3-b]quinazolin-6-one	grey	-0.0	0.44				0.31	-0.0		-0.0	0.44	-0.0		-0.0	0.56		
			958	404	-0.09	0.463	0.12		452	321	0.79	965	045	383	0.75	718	626	
			258	413	1747	76008	571		010	395	7811	784	693	918	9566	830	166	
			08	4	894	3	324		6	41	675	72	6	92	007	8	6	
cg68 5	Perillartine	grey	0.09	0.45				0.01	0.91	-0.0		-0.0	0.93	-0.0		-0.0	0.84	
			371	418	0.16	0.186			353	412	448	0.72	098	741	209	0.86	252	042
			614	507	4816	01639			180	471	587	0604	524	886	525	7381	638	065
			7	2	39	1			4	8	58	295	73	7	7	5	99	1
cg35 8	Oxohongdenafil	grey	0.09					0.04	0.73	-0.0		-0.0	0.85	0.06		-0.0		
			207	0.46	0.15	0.207			217	672	045	0.97	232	305	200	0.62	105	0.93
			813	214	7194	48700			061	047	953	0788	406	200	433	0898	604	293
			1	595	282	7			4	1	84	04	86	6	8	431	18	213
cg67 1	(-)-Erythromycin	grey	-0.0	0.46				-0.0	0.49	-0.0		-0.0	0.66	-0.0		-0.0	0.78	
			911	669	-0.11	0.360			857	373	478	0.70	546	281	524	0.67	342	514
			489	537	4363	53570			249	049	008	3103	767	113	284	5888	002	873
			57	7	305	1			23	4	33	811	4	8	45	378	96	1
cg69	FRH	grey	0.09	0.47	0.05	0.649	0.06	0.61	0.01	0.92	-0.0	0.60	0.00	0.95	0.00	0.98		

7			023	121	7008	35229	389	026	215	2829	644	690	659	8116	182	840
			083	440	738	5	551	662	575	238	969	223	036	018	370	492
			7	5			6	9	3		28	2	1		5	8
			0.08	0.48				0.80	-0.0		-0.0	0.92	0.02		-0.0	0.99
cg37	HexCer-NS (d18:1/24:0)	grey	829	079	0.15	0.206	0.03	636	395	0.75	119	384	096	0.86	007	552
2			912	883	7681	06431	075	483	196	2725	959	097	057	7331	033	806
					462	3	242			358				292		
			7	8				2	38		09	3	4		39	1
			-0.0	0.49			-0.0		-0.0		-0.0	0.82	0.17		0.00	
cg20	(+/-)-Equol	grey	858	319	-0.00	0.941	041	0.97	907	0.46	277	488	042	0.17	352	0.97
8			303	741	9135	96498	959	332	926	8446	617	155	722	1269	631	758
			32	9	469	9	35	629	29	448	45	8	9	592	5	189
			-0.0	0.49			-0.5		0.07		-0.0	0.79	0.02		0.27	0.02
cg23	2-Hydroxyisocaproic	grey	856	405	0.13	0.289	254	5.90	800	0.53	328	364	725	0.82	987	284
1	Acid		608	456	2345	46105	317	E-0	626	3568	168	380	169	8049	824	655
			7	6	459	4	74	6	2	929	55	4	9	322	9	6
cg76	N'-[6-(tert-butyl)thieno[3,	grey	0.08	0.49	-0.01	0.915	0.05	0.64	0.05	0.64	0.00	0.98	-0.0	0.60	-0.0	0.88
9	2-d]pyrimidin-4-yl]-4-met		563	417	3238	97813	750	647	731	7575	265	309	648	4920	176	797

	hylbenzohydrazide		640	835	679	6	937	726	801	592	850	795	519	238	766	055	
			9	7			4	6	4		4	6	06		15	5	
			0.08	0.50			-0.0	0.60	0.22		0.04	0.72	0.25		0.16	0.18	
cg52	D-Glucosamine	grey			0.20	0.106				0.06				0.03			
6	6-phosphate		428	102	0593	32045	655	095	943		389	634	377		463	649	
			778	831			631	737	383		3865	864	698	977		863	810
			1	5	628	6	9	6	7	166	1	3	2	199	3	4	
			0.08	0.50			0.21	0.08	0.15		0.01	0.92	0.04		-0.0	0.87	
cg38	Jasmonic acid	grey			0.04					0.21				0.74			
6			404	225	0055	0.749	280	624	424		6236	157	652	145		195	592
			749	391	497	48156	578	984	902		195	165	687	207		911	795
			3	8			8	2	5		5	1	3	876	63	1	
			-0.0	0.51			-0.5		0.06		-0.0	0.83	0.04		0.28	0.02	
			822	154	0.15			3.69		0.58				0.72			
cg3	2-Hydroxycaproic acid	grey			0.220	350			896		256	777	436		361	101	
			353	658	2965	12968	169	E-0	090	2187		885	438	665		102	875
			37	1	287		1	6	2	433		59	2	6	776	8	6
			0.08	0.52	0.01	0.875	0.19	0.12	0.05	0.67	-0.0	0.93	0.00	0.94	-0.0	0.89	
cg39	N-Acetyl-L-methionine	grey	002	301	9580	99750	188	270	313	1754	106	259	795	9442	164	588	
0			212	355	092	9	837	822	727	908	138	374	678	296	203	642	

			1	1				5	6		23	8	7		52	9
			0.07	0.53			0.16		-0.0		-0.0	0.61	-0.0		0.00	0.99
			778	475	0.05	0.687	441	0.18	714	0.56	632	375	586	0.63	090	425
cg4	3-Hydroxybenzoic acid	grey	091	538	0530	00038	307	711	642	8531	735	457	772	9790	395	254
			5	4	913	6	1	066	33	791	34	6	65	407	3	4
			-0.0	0.53			0.02	0.84	-0.0		-0.0		-0.0		0.03	0.76
cg22	L-(+)-Arabinose	grey	777	482	-0.06	0.583	484	305	762	0.54	276	0.82	912	0.46	776	337
1			672	726	8802	05688	072	942	971	2599	424	562	201	6345	550	353
			7	7	435		3	4	32	796	02	252	91	745	1	5
			0.07	0.55			0.01	0.88	0.30		0.24	0.04	0.25		0.01	0.91
cg29	DL-Glutamine	grey	309	971	0.28	0.021	881	080	664	0.01	350	881	037	0.04	362	351
6			596	200	3144	23999	582	163	639	2270	889	034	273	2601	852	327
			1	4	87	1	6	7	3	85	9	2	7	835	1	5
			0.07	0.57			0.25	0.04	0.05		-0.0	0.92	-0.0		-0.0	0.68
cg84	3-(3,4-Dihydroxyphenyl)-	grey	057	338	-0.00	0.967	111	197	726	0.64	113	799	327	0.79	509	473
3	2-Methylalanine		150	445	5050	89883	561	086	232	7895	390	987	058	4326	160	944
			1	8	119	5	1	7	1	389	41	5	72	348	71	8

cg29 8	4-Aminophenol	grey	-0.0	0.59			-0.0	0.57	-0.0			0.87	-0.0		-0.0	0.87	
			673	112	-0.02	0.851	705	376	422	0.73	0.01	774	545	0.66	191	886	
			373	281	3550	11826	021	196	213	6414	930	946	578	3499	234	765	
					025	6				961	13				933		
			95	8			99	3	93			9	96		11	2	
cg12 8	Deoxyribose 5-Phosphate	grey	0.06	0.59			0.03	0.78	0.03		0.06	0.61	0.13		0.05	0.66	
					0.15	0.213	429	456	239	0.79		275	669	502	0.27	501	086
			733	112	5171	46983	543	545	006	6269	042	469	582	9716	209	901	
			621	934	037	2				423				971			
			2	9			2	1	2		3	7	2		2	3	
cg59 2	Lactitol	grey	-0.0	0.59			-0.1	0.34	-0.0		-0.0	0.53	-0.0		-0.0	0.89	
			671	192	0.09	0.460	188	195	680	0.58		772	760	003	0.99	167	407
			921	517	2421	47320	292	951	558	7161	403	679	900	7519	079	301	
					023	5				232				898			
			55	1			08	6	12		4	5	65		98		
cg73 7	Meclocycline	grey	-0.0	0.59			-0.2	0.09	0.02		-0.0	0.93	0.07		0.12	0.33	
			668	361	0.05	0.646	065	606	798	0.82		105	303	050	0.57	078	402
			872	091	7518	42416	832	678	632	3487	441	515	045	3771	318	337	
					628	8				65				445			
			94	6			03	9	2		59	6	9		7	5	
cg78	5-[4-(tert-butyl)phenyl]-1,	grey	0.06	0.59	-0.00	0.984	0.16	0.19	-0.0	0.76	0.01	0.90	0.02	0.86	-0.0	0.86	

0	3,4-oxadiazole-2-thiol		666	485	2401	73476	300	097	373	5610	522	343	084	8049	214	441
			233	621	02	2	123	774	979	374	414	330	612	171	250	878
			5	3			7	4	4		5	8	8		69	9
			-0.0	0.59			-0.2	0.03	0.00		-0.0	0.95	0.00		0.00	0.97
cg27					-0.00	0.974				0.99				0.94		
5	Pyridoxine	grey	665	534			612	414	142		076	137	907		466	035
			736	767			009	221	172		520	596	255		311	768
					941	6				589				973		
			12	2			2	3	5		9	6	6		5	1
			0.06	0.59			0.27	0.02	-0.0		0.20	0.09	-0.0		-0.1	0.30
cg64	4-(4-nitrophenylazo)aniline	grey			-0.01					0.57				0.58		
4			583	942		0.896	237	693	697		645	627	689		295	001
			808	890	6377		094	305	724	7744	639	556	974	1987	093	141
					042	15951	8	9	27	216	3	2	31	099	76	3
			0.06	0.60			0.08	0.49	-0.0		-0.0	0.88	-0.0		-0.0	0.79
cg70	bicyclo[2.2.2]oct-2-en-1-yl				-0.02	0.864				0.75				0.64		
9	4-methylbenzene-1-sulfonate	grey	427	814			535	561	390		184	315	573		327	409
			389	899	1409	51408				5734	423	058	227	7548	430	757
					867	4				115				581		
			2	1			4	7	37		92	9	19		68	7
cg29	Histamine	grey	0.06	0.61	0.27	0.025	-0.0	0.50	-0.0	0.94	0.10	0.39	0.22	0.06	-0.0	0.76
9			296	548	5554	13049	833	563	094	0212	733	100	917	4174	379	235



			626	081	6	2	855	841	118	621	285	427	435	376	326	700
			9	4			07	7	12		8	6	7		44	4
			0.06				0.20	0.09	-0.0		-0.1	0.41	0.01		-0.1	0.33
cg78	Arachidic Acid	grey	264	0.61	-0.08	0.503	868	266	068	0.95	031	000	105	0.92	211	251
4			905	726	3733	85907	223	220	864	6235	120	787	653	9789	568	897
			6	512	249	4	1	4	68	961	01	2	9	106	69	3
			0.06	0.62			0.02		0.04		-0.0	0.94	-0.0		-0.0	0.92
cg70	2-(2,6-dimethoxyphenyl)-		084	747	-0.00	0.948	370	085	909	0.69	090	222	556	0.65	120	352
0	5,6-dimethoxy-4H-chrom	grey	067	913	8028	98489	828	012	584	5448	942	610	766	7026	463	162
	en-4-one		1	8	868	8	8	927	1	444	95	3	72	812	61	2
			-0.0	0.63			-0.2	0.03	-0.0		0.02	0.87	0.06		-0.0	0.94
cg25	D-Panthenol	grey	591	699	-0.01	0.886	576	674	757	0.54	020	206	781	0.58	083	687
8			672	340	7967	13977	496	687	958	5262	573	807	593	8482	611	636
			49	7	405	6	19	7	53	538	3	9	3	669	84	2
			-0.0	0.63	0.07	0.539	0.03	0.78	0.19	0.11	0.11	0.35	0.05	0.68	-0.1	0.41
cg30	Cortisol	grey	588	876	6835	74718	364	854	539	5887	644	179	143	1689	027	189
4			566	558	486	4	628	773	613	292	531	984	639	446	000	070



cg48 0	Bosentan	grey	0.05	0.66			-0.0	0.44			0.00	0.94	-0.0		0.03	0.80	
			371	837	0.18	0.139	966	028	0.11	0.35	888	354	132	0.91	027	930	
			883	082	3887	40680	145	519	679	0332	563	950	489	5913	653	444	
					759	6			817	358				24			
			5	4			93	5			1	8	41		9	1	
cg59 3	5-[(dimethylamino)methylidene]-3-phenyl-1,3-thiazolane-2,4-dione	grey	-0.0	0.68			0.06	0.58	-0.0			0.72	-0.0		-0.0	0.74	
			515	110	-0.11	0.345	816	654	702	0.57	-0.0		0.74	403	777		
			359	629	7897	78451	784	452	241	5277	443	352	409	3990	372	763	
					568	1				711	704	337	641	718			
			76	6			6	4	55			8	91		62	6	
cg26 3	Paracetamol	grey	-0.0	0.68			-0.0	0.45	0.00		0.03	0.77	-0.0		0.04	0.74	
			504	726	0.01	0.890	933	614	616	0.96		662	031	158	0.89	076	522
			853	795	7279	47237	116	381	825	0796	549	735	484	9493	008	294	
					389	9				46				555			
			64	1			69	5	5		9	9	34		5	6	
cg64	5-oxoproline	grey	-0.0	0.70			-0.1	0.36	-0.0		0.01	0.89	0.07		0.22	0.07	
			474	522	0.05	0.687	129	632	055	0.96		717	110	499	0.54	028	552
			427	563	0375	91243	999	748	589	4666	944	203	675	9520	188	099	
					675	5				293				315			
			85	3			65	6	68		3	7	4		1	2	
cg73	TMK	grey	-0.0	0.71	-0.03	0.785	0.04	0.72	-0.0	0.95	-0.0	0.58	-0.0	0.74	-0.0	0.76	

6			463	144	4186	23463	382	679	065	8417	683	558	411	3027	373	618
			954	479	286	4	441	160	428	481	428	154	238	164	038	338
			88	5			1	3	84		93	1	68		32	7
			0.04	0.71			0.11	0.35			-0.0	0.91	-0.1		0.26	0.03
					0.04	0.728			0.03	0.81				0.29		
cg51	methadone-d9	grey	621	253			640	195			138	242	295		286	297
			146	952	3498	74691	812	471	000	1007	002	769	553	9838	581	522
					145	5			102	583				242		
			5	8			2	8			58	2	96		1	8
			-0.0	0.71			-0.0	0.68	-0.0				0.25		-0.1	0.33
					0.10	0.415				0.44	0.02	0.84		0.03		
cg69	Saccharin	grey	459	423			501	930	956				572		200	703
			265	539	1950	32906	390	331	961	4663	510	143		8227	380	582
					663	8				763	178	136	296			
			85	6			81	2	42				7	761	9	3
			-0.0	0.71			0.01		-0.0		-0.0	0.83	-0.0		-0.0	0.86
					-0.06	0.611		0.92		0.87				0.68		
cg71	L-Histidinol	grey	454	708			111		189		262	435	509		210	687
			490	115	3654	61883	006	945	971	9661	377	471	773	4380	333	483
3					205	1		006		472				046		
			59	9			7		47		56	9	4		52	9
cg49	3-amino-2-phenyl-2H-pyr	grey	0.04	0.74	0.12	0.320	-0.1	0.12	-0.0	0.53	0.04	0.74	0.13	0.27	0.26	0.03
5	azolo[4,3-c]pyridine-4,6-d		137	151	4137	67274	930	032	784	1410	099	377	677	3473	475	169

	iol		459	497	462	4	946	881	168	525	998	470	597	377	580	104
			4	4			83	2	51		2	6	8		5	9
			-0.0	0.75			-0.0	0.48	0.29		-0.0	0.74	0.00		-0.0	0.96
cg42					0.12	0.312				0.01				0.97		
	ACar 5:0	grey	392	429			880	200	597		401	902	378		052	672
6			612	120	6308	21646	575	448	176	5827	308	597	426	5942	345	702
			21	3	318	4	94	2	3	327	14	4	9	448	69	2
			-0.0	0.75			-0.2		-0.0		0.05	0.65				0.49
cg12					-0.07	0.565		0.07		0.89			0.00	0.94	0.08	
	4-(octyloxy)benzoic acid	grey	391	479			174		160		533	901		888	3578	629
0			786	199	1979	74080	396	946	213	8402	258	501	888	3578	629	401
			09	1	293	2	3	715	59	686	6	4	105	564	244	6
			0.03	0.75			0.21	0.08	0.09		-0.0	0.86	-0.0		-0.0	0.54
cg26					-0.06	0.628				0.42				0.62		
	Cotinine	grey	863	806			548	227	992		219	135	617		758	522
2			902	533	0713	19921	240	844	269	4716	143	293	639	2255	031	382
			9	9	651	7	5	2	2	023	32	5	85	261	32	9
			-0.0	0.75	-0.02	0.824	-0.2	0.05	-0.0	0.86	0.08	0.52	-0.0	0.60	0.10	0.38
cg21																
	MAG (18:3)	grey	385	836	7821	51091	375	476	213	5122	034	132	653	2120	854	563
7			896	522	453	2	724	088	128	404	698	237	542	223	674	728

			3	8			25	1	29		9	6		3	6
cg50	3-(3,4-dimethylphenyl)-3,		-0.0	0.76			-0.1	0.40	-0.0		-0.0	0.86	-0.0	0.24	0.04
2	4-dihydro-1,2,3-benzotria	grey	375	454	0.19	0.108	042	486	378	0.76	215	377	113	881	394
	zin-4-one		725	753	9120	96806	418	919	163	3063	274	687	555	542	998
			47	9	276	8	37	8	92	984	82	6	03	621	8
															7
cg49			0.03	0.76			0.23	0.06	0.07		0.08		-0.0	-0.0	0.47
4	Glycitin	grey	736	578	0.01	0.917	115	184	700	0.53	477	854	634	891	632
			942	396	3038	24280	054	960	330	8859	538	854	725	987	244
					708	7				446	5	602	725	38	
			8	6			3	2	6		5	602	725	38	4
															1
cg21			-0.0				0.05	0.67	-0.0		0.00	0.97	-0.0	0.03	
3	L-(-)-Glyceric acid	grey	367	0.76	-0.03	0.791	259	489	071	0.95	425	298	789	672	0.76
			957	927	3214	20198	918	186	482	4574	017	163	759	254	972
			37	927	104	2				266	2	4	51	383	555
							2	3	14		2	4	51	3	
cg82			0.03	0.77			0.18	0.13	0.12		-0.0	0.94	0.01	-0.0	0.79
3	10-Hydroxydecanoic acid	grey	550	715	-0.00	0.955	814	031	209	0.32	085	537	632	328	322
			604	353	7008	46393	887	253	342	8767	971	911	285	844	792
					072	2				312	93	6	7	188	
			9	9			3	2	4		93	6	7	9	2



2			136	364	8011	85851	436	601	130	2979	455	670	053	6085	148	601
			070	925	149	7	757	182	094	807	118	655	356	01	155	328
			11	9			8	5	3		81	9	31		25	5
			-0.0	0.92			-0.0	0.73	-0.0		-0.0	0.64	-0.0		-0.0	0.70
cg29	4-Methoxycinnamic acid	grey			0.03	0.764				0.52				0.56		
0			119	442	7568	57320	431	094	787	9400	572	809	716	7773	482	027
			029	911	33	4	322	166	998	909	269	829	039	866	787	540
			97	5			68	3	78		91	2	86		08	9
			-0.0	0.92			0.10	0.42	0.11		-0.0	0.84	-0.0		-0.0	0.53
cg47	H-Gly-Pro-OH	grey			-0.08	0.495				0.37				0.49		
0			118	505	5372	51747	004	413	201	0528	253	010	858	3228	777	469
			040	571	001	2	720	623	935	169	143	593	241	572	928	274
			17	8			2	4	4		89	2	7		06	4
			-0.0	0.93			-0.0	0.81	0.03		-0.0	0.80	0.01		0.03	0.80
cg59	N-benzoyl-N'-[2-(2-pyrid	grey			0.08	0.507				0.76				0.90		
1	yl)ethyl]thiourea		103	447	3119	00425	299	105	707	7604	316	054	549	1724	092	532
			173	258	003	7	937	263	050	616	959	423	480	936	050	716
			19	8			33	9	7		74	4	6		6	6
cg20	Amisulpride N-oxide	grey			-0.0	0.425	-0.3	0.00	-0.0	0.86	-0.0	0.63	0.13	0.27	0.13	0.27
0			101	530	9746	53728	408	510	215	3824	597	388	680	3387	591	653



			862	310	492	3	223	517	198	748	134	149	017	703	542	164
			71	5			23	8	44		42	1	7		2	5
			0.00				-0.0	0.59	-0.0		-0.0	0.64	-0.0		-0.0	0.60
cg46	PE (17:0/17:1)	grey	866	0.94	0.10	0.420	668	376	842	0.50	573	714	866	0.48	653	191
9			894	492	0929	03847	590	698	921	1006	936	113	479	9072	918	079
			4	396	985	9	88	9	47	058	94	2	25	95	75	5
			0.00	0.95			-0.1	0.11	0.02		0.02	0.83	0.02		0.02	0.81
cg48	3-(3-pyridinyl)propanoic acid	grey	639	938	0.05	0.643	939	873	218	0.85	625	421	122	0.86	925	563
6			115	094	8014	58396	108	912	987	9627	955	905	631	5664	312	514
			7	1	098	3	15	8	7	185	4	5	5	816	2	9
			0.00	0.97			0.14	0.23	-0.0		-0.0	0.86	0.11		0.16	0.17
cg43	Dl-2-Amino-3-phosphono propionic acid	grey	421	320	-0.03	0.766	798	570	408	0.74	207	853	650	0.35	953	356
7			556	157	7189	87819	306	456	500	4679	680	891	382	1556	008	827
			1	6	748	6	7	8	26	875	62	4	7	214	8	1
			0.00	0.98	0.13		-0.2	0.05	-0.0	0.72	-0.0	0.75	0.04	0.70	0.04	0.69
cg53	Stiripentol	grey	226	558	7138	0.272	363	607	449	0101	388	663	704	7606	859	842
5			728	494	789	1908	358	189	429	717	744	637	148	44	136	709

			3	6			06	05		94	2	2		2	1	
			-0.0				-0.2	0.01	0.08		-0.0	0.92	0.12		0.04	0.72
cg48	3-(methylsulfanyl)-5H-[1,		0.99	0.17	0.170		988	478	233	0.51				0.33		
1	2,4]triazino[5,6-b]indole	grey	011				988	478	233	1009	123	182	062	4664	350	873
			097	294	0849	19495	570	815	962	446	141	701	423	585	056	241
			45	412	665	5	37	7	2		13	7	8		4	2
			0.00	0.99			-0.0	0.49	-0.0		-0.0		-0.0		-0.0	0.96
cg78	5 $\alpha$ -Pregnan-3,20-dione		0.22				858	314	820	0.51	0.98			0.66		
8		grey	029	809		0.070	858	314	820	2403	029		543	4637	057	335
			943	615	4406	07437	409	362	691	3	559	120	617	617	646	998
			2	5	091		73	2	2		04	749	06		26	2
			-0.0	0.99			-0.1	0.34	-0.0		-0.0	0.99	0.19		0.07	0.54
cg61	acenaphtho[1,2-b]quinox		0.14				191	077	237	0.84				0.12		
1	line	grey	002	810		0.257	191	077	237	9892	003	759	194	2599	661	093
			979	560	1522	01267	189	520	462	198	777	839	317	35	031	942
			45	9	179		84	6	31		19	3	6		4	9
			0.90				0.66				0.34	0.00	0.27		0.13	0.27
cg69	1,2-dihydroxyheptadec-1	turq	901	5.13	0.67		448	1.18	0.37	0.00	207	493	093	0.02	616	564
9	6-yn-4-yl acetate	uois	784	E-2	9390	3.58E	448	E-0	860	1721	265	478	239	7782	404	576
		e	5	6	894	-10	268	9	093	04	7	2	1	623	3	1

cg59 6	N-(((2R,4S,5R)-5-Ethyl-1-azabicyclo[2.2.2]oct-2-yl)methyl)-2-furamide	turq	0.86				0.67	0.30		0.29	0.01	0.25		0.10	0.38	
		uois	974	2.67	0.67	7.46E	728	4.25	416	0.01	318	688	891	0.03	915	296
		e	488	E-2	0284	-10	472	E-1	059	3030	810	870	976	5796	386	956
			4	1	566		7	0	3	542	4	9	5	941	5	5
cg33 2	N1-ethyl-4-methylbenzene-1-sulfonamide	turq	0.86				0.57	0.39		0.26	0.02	0.26		0.17	0.17	
		uois	330	1.13	0.63	9.55E	051	5.70	932	0.00	836	935	989	0.02	074	044
		e	852	E-2	6027	-09	906	E-0	379	0895	296	618	009	8412	942	950
			3	0	023		5	7	5	432	5	6	6	166	7	3
cg49 9	(2E,4E)-N-[2-(4-hydroxyphenyl)ethyl]dodeca-2,4-dienamide	turq	0.86				0.58	0.40		0.34	0.00			0.11	0.35	
		uois	102	1.84	0.76	6.63E	971	1.89	116	0.00	633	439	0.43	0.00	460	950
		e	488	E-2	6103	-14	789	E-0	238	0843	011	162	638	0249	722	543
			2	0	754		4	7	7	264	6	3	348	378	3	1
cg53 7	Capric acid	turq	0.85				0.58	0.42		0.34	0.00	0.14		0.08		
		uois	415	7.73	0.62	2.14E	185	2.99	280	0.00	409	467	143	0.25	307	0.50
		e	703	E-2	4193	-08	589	E-0	455	0405	128	026	212	7318	735	721
			6	0	82		4	7	2	219	7	6	5	605	4	788
cg57	Nonanoic acid	turq	0.84	2.62	0.71	1.46E	0.51	9.27	0.48	4.53	0.29	0.01	0.28	0.02	0.07	0.53

6		uois	801	E-1	5591	-11	591	E-0	002	E-05	901	473	113	2215	754	601
		e	038	9	242		746	6	933		895	162	665	857	150	731
			2				2		9		7	1	3		1	8
		turq	-0.8				-0.5		-0.3		-0.3	0.01	-0.2		-0.2	0.06
cg10	2-Methoxyestrone	uois	388	1.46	-0.66		862	2.32	0.01		096	139	698	0.02	322	057
0		e	916	E-1	5457	1.09E	250	E-0	0621		944	184	048	8464	570	797
			71	8	987	-09	45	7	34		95	5	43	185	08	7
		turq	0.82				0.42	0.00	0.39		0.26	0.03	0.30		0.27	0.02
cg86	12-Hydroxydodecanoic acid	uois	283	2.35	0.88		050	043	413	0.00	112	419	943	0.01	624	475
		e	796	E-1	0690	1.92E	686	903	416	1058	593	557	805	1463	561	301
			4	7	303	-22	4	5	1	812	4	5	5	634	1	5
		turq	0.82				0.42	0.00	0.33		0.25	0.04	0.42		0.23	0.05
cg10	3-Hydroxydecanoic acid	uois	255	2.46	0.86		917	032	408	0.00	099	207	465	0.00	783	448
9		e	078	E-1	1110	1.81E	522	350	126	6116	375	383	429	0379	477	598
			6	7	021	-20	4	1	4	32	8	2	7	741	9	
cg13	15-Deoxy- $\Delta$ 12,14-prostagl	turq	-0.7	1.74	-0.60	9.64E	-0.5	6.32	-0.2	0.02	-0.2	0.04	-0.2	0.03	-0.2	0.10
9	andin D2	uois	943	E-1	0812	-08	239	E-0	757	5042	446	773	661	0745	020	372



			4				1	1	4		3	7	2			
cg16	11-Epiprostaglandin E1	turq	-0.7				-0.5		-0.2		-0.2	0.03	-0.2		-0.1	0.18
7		uois	433	8.79	-0.56	9.12E	117	1.13	779	0.02	556	826	644	0.03	647	608
		e	501	E-1	1962		228	E-0	279	3853	763	422	399	1902	900	781
			4	3	063		62	5	74	992	15	5	08	727	13	4
cg32	N6-Acetyl-L-lysine	turq	0.73				0.41	0.00			0.36	0.00	0.32			0.01
7		uois	991	1.27	0.79	8.96E	407	054	794	0.25	116	288	985	0.00	0.29	663
		e	878	E-1	9027		100	789	852	6521	521	884	602	6836	385	015
			9	2	05	-16	9	2	852	466	9	4	5	342	209	1
cg46	N,N-Dimethyldecylamine N-oxide	turq	-0.7	1.44	-0.56		-0.3	0.00	-0.2		-0.3	0.00	-0.2		-0.2	0.01
6		uois	386	E-1	3045	8.60E	708	217	989	0.01	276	723	904	0.01	985	489
		e	913	2	28		211	608	613	4751	803	531	491	7992	656	035
							27	6	97	697	41	3	31	002	85	5
cg64	N~5~-(1,3,5-trimethyl-1H -pyrazol-4-yl)-1H-1,2,4-tri azole-3,5-diamine	turq	0.72				0.56		0.15		0.24	0.05	0.18		0.08	0.47
7		uois	767	4.48	0.62	2.65E	508	7.69	032	0.22	141	084	579	0.13	847	990
		e	169	E-1	1040		546	E-0	296	8297	980	083	353	5282	848	459
			9	2	076	-08	5	7	7	569	9	9	6	159	2	9

cg53 3	Gamma-Aminobutyric acid	turq uois e	0.72				0.00			0.00	0.41		0.19	0.11			
			373	6.63	0.67		0.45	0.50		0.42	0.00	0.41		0.19	0.11		
			317	E-1	8854	3.74E	731	368		1.62	033	802		0.00	598	477	
			6	2	172	-10	092	874		E-05	014	891		0478	405	310	
cg74 1	Linolelaidic (C18:2N6T)	turq uois e	0.71				0.35		0.23		0.25	0.03	0.31		0.14	0.24	
			413	1.67	0.84		0.00	0.05		0.25	0.03	0.31		0.14	0.24		
			562	E-1	3591	6.11E	865	690		0.05	533	853	600		0.00	373	956
			8	1	155	-19	873	212		5468	329	321	861		9743	772	351
cg60 5	2-[5-(2-hydroxypropyl)ox olan-2-yl]propanoic acid	turq uois e	0.71				0.35	0.00	0.50		0.28	0.02	0.38		0.08	0.51	
			406	1.68	0.74		0.00	0.50		0.28	0.02	0.38		0.08	0.51		
			851	E-1	9339	4.57E	224	372	680	1.41	242	158	519		0.00	0.08	0.51
			3	1	458	-13	975	445	042	E-05	297	650	892		1404	062	988
cg26 5	D-(+)-Proline	turq uois e	0.70				0.40	0.00	0.50		0.17	0.15	0.42			1.66	
			332	4.55	0.69		0.40	0.00	0.50		0.17	0.15	0.42			1.66	
			816	E-1	3595	1.08E	587	072	504	1.53	886	073	295		0.00	0.50	1.66
			5	1	311	-10	294	192	490	E-05	127	829	506		0403	326	E-0
cg14	Prostaglandin A2	turq	-0.7	5.21	-0.52	7.21E	-0.4	0.00	-0.2	0.04	-0.2	0.06	-0.2	0.05	-0.1	0.13	





		e	039	0	887		508	3	571	689	145	920	749	614	181	140		
							9		5		3	9	8		6	9		
cg44	N-cyclohexyl-1-methyl-5-	turq	0.67	6.46	0.58		0.53		0.25		0.23	0.05	0.18		0.19	0.11		
3	(1H-pyrrol-1-yl)-1H-pyra	uois	209	E-1	0705	3.20E	826	3.14	240	0.04	734	500	619	0.13	395	865		
	zole-4-carboxamide	e	084	0	467	-07	003	E-0	617	0893	446	065	063	4434	330	681		
							4	6	5	076	8	6	7	428	3	1		
			0.67				0.33	0.00	0.08		0.47				0.10	0.41		
cg77	2,2,5,5-tetramethyl-2,5-di	turq	107	7.01	0.68		2.69E		260	636	799	0.48	6.34	0.11	0.36	103	955	
5	hydro-1H-pyrrole-3-carbo	uois	236	E-1	2839	-10	079	063	160	2334	349	E-0	265	7795	532	104		
	xamide	e	8	0	684		1	3	3	165	9	5	66	06	1	5		
			0.66				0.34	0.00	0.46		0.23	0.05	0.57		0.38	0.00		
cg43	(S)-beta-Aminoisobutyric	turq	673	9.87	0.76		9.95E		391	469	087	9.85	476	777	390	4.71	091	160
3	Acid	uois	881	E-1	2690	-14	903	233	410	E-05	715	150	773	E-07	599	321		
		e	7	0	998		4	8	7		4	1	2		7	4		
cg62	(2R)-2-[(2R,5S)-5-[(2S)-2-h	turq	0.66	1.66	0.52		0.58	2.90	0.26	0.03	0.14	0.23	0.25	0.04	0.04	0.73		
1	ydroxybutyl]oxolan-2-yl]	uois	000	E-0	2273	6.87E	239	E-0	405	2161	926	164	206	1177	315	079		
	propanoic acid	e	731	9	801	-06	119	7	545	939	019	147	310	327	673	480		

			9			5	7		4	9	3		9	9
cg56	4-heptyl-3-methyl-1H-pyr	turq	0.65			0.27	0.20		0.39	0.00	0.18		0.46	
5	azol-5-ol	uois	1.79	0.72	4.54E	0.02		0.09				0.13	8.55	
		e	903	E-0	7532	637	479	9038	266	110	792	0773	444	E-0
			362	9	662	-12	991	823	737	963	765	317	722	5
			8			2	2	203	4	3	6		5	
			-0.6			-0.3	0.00	-0.1	-0.2	0.02	-0.3		-0.2	0.03
cg34	Myristic acid	turq	1.79	-0.49		0.00			0.15			0.01		
2		uois	589	E-0	2896	2.62E	371	564	728	664	012	3972	666	046
		e	841	9	916	-05	108	193	603	599	929	476	229	380
			29			92	9	87	393	58	8	32	151	4
			0.65			0.34	0.00	0.58		0.52	0.44		0.24	0.04
cg51	N-Methylglutamic acid	turq	2.04	0.63		0.00			7.01			0.00	259	968
1		uois	726	E-0	8177	8.21E	492	456	2.30	183	E-0	406	0187	
		e	778	9	613	-09	699	447	E-07	698	6	707	729	805
			4			4	8	7		7	1	753	4	1
			0.65			0.69		0.23	0.33	0.00	0.11		0.15	0.22
cg41	5-Methyl-8-nitro-3-spiroc	turq	3.47	0.48		8.42		0.05				0.35	195	322
5	yclohexyl-2,3,4,5-tetrahyd	uois	014	E-0	9118	3.08E	642	315	730	561	668	0816	599	508
	ro-1H-2-benzazepine	e	160	9	865	-05	701	E-1	9563	611	251	166	479	
			7			5	1	7	864	4	4	1	2	5

cg33 7	4-oxo-5-phenylpentanoic acid	turq uois e	0.64				0.57		0.25		0.13	0.28	0.21		0.03	0.77		
			3.97	0.54			3.47			0.03					0.08			
			831			1.91E	930		804		254	871	257		6604	537	797	
			776	E-0	8058	-06	192		914		6445	742	915	171		214	115	847
			9	745		4		7	842		5	4	2		1	9		
cg32 6	Kynurenic acid	turq uois e	0.64				0.32		0.16		0.29	0.01	0.30			0.23	0.06	
			5.01	0.74			0.00		0.19						0.01			
			511			7.45E	095		323		076	786	148		3892	025	289	
			807	E-0	4885	-13	520		860		0338	415	204	726		538	093	931
			9	65		2		038	321		7	7	1		7	2		
cg43 1	N-P-Coumaroyl Spermidine	turq uois e	0.64				0.68				0.32	0.00	0.11			0.14	0.25	
			6.31	0.48			2.32	0.22	0.06						0.33			
			188			4.00E	460		788		5723	947	690	961		8741	234	422
			726	E-0	2986	-05	951		938		444	172	537	808		423	681	264
			9	286		5		0			1	9	1		7	8		
cg67 8	13,14-dihydro Prostaglandin E1	turq uois e	0.63				0.56		0.22		0.35		0.20			0.07	0.54	
			1.19	0.49			5.93		0.06						0.10			
			280			2.17E	981		749		504	0.00	032		6798	530	785	
			486	E-0	7196	-05	088		453		6205	840	344	529		902	959	153
			8	095		3		7	433		1	16	7		3	7		
cg9	2-Isopropylmalic acid	turq	0.62	1.45	0.63	7.87E	0.27	0.02	0.40	0.00	0.17	0.15	0.56	8.64	0.47	4.71		

		uois	999	E-0	8786	-09	952	302	561	0728	661	601	296	E-07	911	E-0
		e	739	8	794		667	545	269	191	780	154	307		282	5
			9				3	3	1		6	1	6		5	
		turq	0.62				0.59		0.20		0.21	0.07	0.27		0.01	0.88
cg42	D-Sphingosine	uois	816	1.64	0.47		6.07E	126	707	0.09	854	791	839	0.02	739	972
2		e	370	E-0	2931		-05	117	E-0	5255	554	269	368	3610	825	364
			7	8	905			5	7	639	1	6	6	067	1	7
		turq	0.62				0.45	0.00			0.20	0.09	0.20			
cg76	Ergothioneine	uois	486	2.05	0.70		3.69E	765	011	0.28	0.02	508	854	834	0.09	0.08
2		e	823	E-0	5641		-11	055	178	505	0345	988	785	502	3202	468
			2	8	961			7	4	649	17	4	9	2	682	313
		turq	-0.6				-0.3	0.00	-0.2		-0.2	0.07	-0.2		-0.1	0.12
cg52	Arachidonoyl amide	uois	245	2.09	-0.46		8.42E	501	395	216	0.07	176	912	338	0.05	893
5		e	476	E-0	4826		-05	174	361	177	3720	781	987	789	8752	423
			51	8	925			93	7	94	974	17	1	62	231	73
cg78	L-beta-Imidazolelactic	turq	0.62	2.74	0.58		2.10E	0.42	0.00	0.48	3.08	0.24	0.05	0.39	0.00	0.13
9	acid	uois	049	E-0	7924		-07	433	038	913	E-05	104	121	594	0998	275

		e	929	8	703		48	403	330		416	317	896	847	651	239	
			3					5	6		7		1		8	4	
cg55	Metanephrine	turq	0.61					0.04	0.41		0.19	0.11	0.41		0.12		
9		uois	987	2.86	0.79		0.24			0.00				0.00	0.70	0.33	
		e	728	E-0	9012		8.98E		798	468	937		463	734	525	070	432
			e	3	8	136		501	312	566		611	513	178	740	834	521
								8	5		4	7	4		1		
cg49	Adipamide	turq	0.61				0.50		0.17		0.12	0.29			0.14	0.24	
8		uois	787	3.26	0.42		0.000		1.49		0.15		0.19	0.10	530	437	
		e	425	E-0	8997		32555		E-0		3517		882	9497	694	742	
			e	4	8	931	5	9	5	1	231	3	3	901	449	6	5
cg56	N1-tetrahydrofuran-2-yl methyl-2-cyanoacetamide	turq	0.61				0.29	0.01	0.65		0.15	0.21	0.55		0.11	0.37	
2		uois	444	4.07	0.69		1.13E	671	555	741	2.02	555	233	675	1.21	187	114
		e	551	E-0	3026			125	518	182	E-09	248	268	311	E-06	587	521
			e	4	8	451		5	7	4		1	9	2		9	9
cg35	4-(1-adamantyl)-2-methyl -1,3-thiazole	turq	0.61	4.13	0.74		0.26	0.02	0.39	0.00	0.16	0.18	0.37	0.00	0.11	0.35	
9		uois	422	E-0	5620		6.88E	743	994	632	0986	514	511	953	1672	458	960
		e	856	8	091		-13	837	044	583	786	896	754	818	432	420	258

			5					3		4	5	5		3	7		
cg35 5	L-Alanyl-L-proline	turq	0.61				0.27	0.02	0.68		0.14	0.24		0.12	0.31		
		uois	5.34	0.68		2.52E	244	689	594	2.07	515	487	0.52	5.70	539	577	
		e	021	E-0	3646		-10	257	133	362	E-10	689	010	615	E-06	108	175
			795	8	259			4	7	5		6	6	627		5	8
cg45 9	5-[(10Z)-14-(3,5-dihydrox yphenyl)tetradec-10-en-1- yl]benzene-1,3-diol	turq	0.60				0.73	3.39	0.23		0.29	0.01	0.09	0.08	0.47		
		uois	696	E-0	6652	0.004	043	E-1	025	0.06	414	651	931	0.42	938	541	
		e	180	8	883	35269	074	2	121	2898	813	596	153	7568	134	656	
			4					4	986		9	7	2	48	2	2	
cg68 2	Citrinin	turq	0.60				0.37	0.00	0.42		0.72		0.25	-0.0			
		uois	671	E-0	1459	1.79E	489	192	718	0.00	608	5.25	493	0.03	090	0.94	
		e	929	8	557	-05	707	577	344	0347	571	E-1	364	8848	209	269	
			2				7	8	6	268	4	2	6	597	85	104	
cg70 1	N-(9-oxodecyl)acetamide	turq	0.60				0.60		0.29		0.17	0.15	0.02	0.21	0.07		
		uois	047	E-0	3207	0.004	761	6.30	522	0.01	563	836	008	0.87	925	693	
		e	357	8	935	78443	477	E-0	548	6106	522	363	963	2797	328	064	
			9				7	8	6	098	5	4	1	041	7	9	

cg39 5	4-oxododecanedioic acid	turq	0.59	1.11	0.48		0.59	1.75	0.16	0.19	0.36	0.00	0.46		0.15	0.22
		uois	851	E-0	3899	3.85E	099	E-0	239	2643	140	286	249	9.24	275	076
		e	855	7	184	-05	763	7	938	584	599	880	191	E-05	826	214
			4				6	7	5		9	4	6		2	
cg24 8	5-Aminovaleric acid	turq	0.59	1.27	0.76		0.15	0.21	0.33			0.25	0.21		0.14	0.23
		uois	629	E-0	3952	8.57E	567	195	414	0.00	0.14			0.07	802	556
		e	702	7	722	-14	988	384	580	6105	234	421	770	9096	622	645
			2				1	3	9	859	95	5	9	384	7	7
cg79 4	Deoxyinosine	turq	0.59	1.30	0.60		0.32	0.00	0.12		0.34	0.00	0.19		0.26	0.03
		uois	591	E-0	3327	8.25E	558	763	234	0.32	897	408	730	0.11	316	277
		e	636	7	769	-08	015	964	004	7783	369	162	830	2293	346	014
			4				5	1	8	858	3	3	8	642	7	4
cg58 6	2-Methoxybenzaldehyde	turq	0.59	1.39	0.40	0.000	0.65	3.06	0.08		0.10	0.38	0.08		0.10	0.41
		uois	480	E-0	2106	81756	186	E-0	608	0.49	835	647	966	0.47	106	939
		e	400	7	335	4	452	9	894	1890	704	309	575	4007	864	690
			1						5	844	4	9	8	421	7	1
cg33	Tiglic acid	turq	0.59	1.84	0.77	2.27E	0.13	0.28	0.36	0.00	0.14	0.24	0.24	0.05	0.15	0.21

0		uois	009	E-0	4857	-14	243	914	863	2321	420	800	133	0920	363	809	
		e	878	7	295		077	751	856	754	830	047	960	151	521	176	
			4				3		6		7	8	4		2	5	
			0.58				0.16	0.19	0.35		0.08	0.51	0.27		0.17	0.15	
cg65	Prolylleucine	turq	788	2.10	0.78					0.00				0.02			
		uois	795	E-0	6582	4.98E	232	285	630		3321	177	392	690	4399	598	752
8		e	6	7	383	-15	285	616	071		334	391	664	148	181	424	516
							2	2	1			5	9	1		8	4
			0.58				0.50		0.38		0.25	0.03	0.34		0.15	0.19	
cg44	3-Methyladipic acid	turq	365	2.70	0.45	0.000	517	1.52	638	0.00	512	869	632	0.00	997	946	
		uois	556	E-0	8099	10984	171	E-0	772	1353	697	576	247	4392	444	109	
0		e	5	7	477	4	5	5	7	025	697	576	247	549	549	444	109
							5		7		025	3	9	5	549	5	8
			0.58				0.11	0.34	0.29		0.29	0.01			0.40		
cg35	Acetylcholine	turq	282	2.83	0.69		808	499	944	0.01	731	533	0.33	0.00	073	0.00	
		uois	328	E-0	9841	6.22E	962	381	119	4585	658	542	002	6806	459	085	
0		e	4	7	103	-11	962	381	119	065	658	542	083	922	459	515	
							6	5	7		1	3		083	922	2	515
cg68	Riboflavin	turq	0.57	3.43	0.47	5.09E	0.34	0.00	0.15	0.21	0.19	0.11	0.36	0.00	0.45	0.00	
7		uois	947	E-0	7249	-05	495	456	409	6706	793	113	757	2395	238	013	



		e	385	7	427		361	114	311	454	543	392	495	851	806	701
			7				9	3	6		3	8	5		5	
cg28		turq	0.57				0.32	0.00	0.11		0.19	0.10	0.14		0.31	0.01
2	N-Acetyl-L-leucine	uois	805	3.72	0.69	7.65E	488	777	621	0.35	883	948	867	0.23	103	102
		e	152	E-0	7506	-11	648	746	248	2770	824	063	322	3502	958	164
			8	7	493		8	2	4	198	2	9	1	822	1	6
cg42	Adenosine 3'5'-cyclic monophosphate	turq	0.57	4.11	0.73		0.23		0.35		0.31	0.01	0.49		0.21	0.08
		uois	631	E-0	1682	2.99E	589	654	313	0.00	480	004	584	2.30	645	087
		e	196	7	18	-12	910	091	738	3632	601	001	410	E-05	273	500
			3				8		9	588	3	6	7		5	9
cg64	Lysops 22:5	turq	-0.5	4.25	-0.62		-0.3	0.00	-0.2		-0.2		-0.1		-0.2	
0		uois	757	E-0	1590	2.55E	342	608	715	0.02	475	511	981	0.11	533	0.04
		e	216	7	815	-08	970	141	769	7399	022	397	345	0767	687	010
			62				33	1	78	202	24	397	67	615	78	417
cg30	N3,N4-Dimethyl-L-arginine	turq	0.57	5.51	0.80		0.14	0.23	0.28	0.02	0.36	0.00	0.33	0.00	0.22	0.07
1		uois	111	E-0	1217	6.55E	777	635	464	0535	852	232	605	5802	336	142
		e	622	7	581	-16	849	996	335	79	403	963	926	797	219	230

				2					2			3	4		1	3
cg68	2-Arachidonyl	Glycerol	turq	-0.5				-0.4	0.00	-0.2		-0.2	0.03	-0.2	-0.1	0.24
6	ether		uois	704	5.72	-0.64		6.59E	042	076	602	628	299	078	448	590
			e	645	E-0	1290		-09	197	257	859	421	159	565	414	794
				73	7	506			65	6	54	29	1	11	88	2
				0.56				0.25	0.03	0.27		0.19		0.27	0.17	0.16
cg66	4-(3,4-dihydro-2H-1,5-ben	turq	uois	759	6.70	0.78		5.79E	558	833	655	670	341	600	396	241
6	zodioxepin-7-ylamino)-4-	e		264	E-0	5456		-15	503	565	153	4587	695	389	656	796
	oxobutanoic acid			2	7	397			6	2	6	436	442	51	1	4
				0.56				0.57				0.13	0.27	0.02	0.19	0.12
cg55	3-methyl-5-oxo-5-(4-tolui	turq	uois	581	7.39	0.30	0.013	786	3.76	0.21	0.08	658	413	651	106	434
2	dino)pentanoic acid	e		294	E-0	3913	10811	681	E-0	126	8605	979	311	810	893	488
				8	7	866	4	4	7	362	742	6	2	6	251	5
				0.56				0.53		0.21		0.15	0.21	0.22	0.10	0.41
cg49	HPK	turq	uois	557	7.49	0.52		182	4.32	891	0.07	322	933	203	162	682
3		e		127	E-0	1821	7.01E	392	E-0	721	7395	500	804	717	631	230
				2	7	741	-06	5	6	9	731	4	1	2	3	7

cg79 8	methyl 6-[[4-(trifluoromethyl)anil ino]carbonyl]nicotinate	turq uois e	-0.5	8.08	-0.53		-0.4	0.00	-0.2	0.02	-0.2	0.04	-0.1	0.13	-0.1	0.25	
			641	E-0	7301	3.29E	147	053	683	9358	443	798	842	8669	413	768	
			966	7	822	-06	718	494	599	064	814	216	253	376	240	625	
			71				91	8	69		6	7	41		02	1	
cg10 5	L-Ascorbate	turq uois e	0.56	8.87	0.57		0.31	0.01	0.32	0.00	0.41	0.00	0.41	0.00	0.18	0.13	
			246	E-0	9310	3.47E	231	068	204	8364	687	049	055	0617	643	390	
			961	7	532	-07	243	098	542	884	675	772	121	307	753	937	
			5				2	2	6		7	9	6		8		
cg79 5	Pantetheine	turq uois e	0.56	9.58	0.30	0.014	0.71	1.50	0.20	0.09	0.14	0.24	0.10	0.41	-0.0	0.48	
			105	E-0	0047	37666	531	E-1	970	1033	423	790	126	8484	871	638	
			888	7	957	3	206	1	806	099	811	168	603	586	823	655	
			8				9		2		9	3	2		98	7	
cg45 5	Val-Ser	turq uois e	0.55	1.13	0.72		0.30	0.01	0.18	0.13	0.19	0.12	0.40	0.00	0.13	0.29	
			790	E-0	2078	7.80E	480	282	571	5453	272	106	202	0819	029	708	
			375	6	948	-12	672	927	348	534	177	057	004	883	060	053	
			9				4		8		1	1	9		6	8	
cg57	11-Deoxy	prostaglandin	turq	0.55	1.28	0.74	9.84E	0.17	0.16	0.22	0.06	0.19	0.11	0.49	2.34	0.31	0.01

9	F1 $\alpha$	uois	565	E-0	2294	-13	486	022	502	9291	842	023	543	E-05	402	023
		e	828	6	675		422	752	002	197	581	353	155		727	649
			6				4	6	6		4	5	3		6	8
			0.55				0.26	0.02	0.17		0.08	0.47	0.10		0.05	0.63
cg56	Zolpidem-d6	turq	458	1.35	0.69					0.15				0.38		
4		uois	643	E-0	2862	1.15E	999	835	615	7125	926	598	916	2930	981	330
		e	1	6	235	-10	006	126	105	59	654	596	266	986	419	813
							8	8	8		3	3	3		6	5
			0.55				0.40	0.00	0.12		0.24	0.04	0.19		0.17	0.16
cg52	D-3-Phenyllactic acid	turq	355	1.43	0.50					0.30				0.12		
0		uois	109	E-0	6915	1.40E	852	066	909	1571	751	510	098	4512	096	989
		e	6	6	544	-05	615	077	551	66	527	228	529	876	956	084
							5	4	5		2	1	5		2	9
							0.52		0.22		0.20	0.09	0.12		0.16	0.19
cg55	1,4-dihydroxy-1,4-dimeth	turq	0.54	1.88	0.47					0.06				0.33		
6	yl-7-(propan-2-ylidene)-d	uois	832	E-0	1349	6.48E	905	E-0	649	7435	618	672	059	4769	108	631
	ecahydroazulen-6-one	e	378	6	87	-05	485	6	744	257	644	116	829	301	648	364
							1	6	5		6	8	8		1	3
cg27	Pipecolic acid	turq	0.54	2.01	0.71	1.70E	0.17	0.16	0.24	0.05	0.26	0.02	0.28	0.02	0.24	0.04
2		uois	706	E-0	3964	-11	349	358	206	0210	811	951	066	2448	394	839

		e	959	6	695		174	547	102	395	077	458	957	205	918	100
			2				4	3			9	5	4		2	2
cg66	N	turq	0.54				0.10	0.42	0.24		0.15	0.21	0.50			
3	alpha-Acetyl-L-Arginine	uois	401	2.35	0.69	8.99E	063	139	379	0.04	350	848	144	1.80	0.61	3.25
		e	686	E-0	5676	-11	691	635	735	8535	638	263	241	E-05	790	E-0
			5	6	969		3	3	4	273	3	1	8		603	8
cg72	1-(2-pyridin-2-yl-diazenyl)	turq	0.53	3.22	0.64		0.27	0.02	0.17		0.24	0.04			0.25	0.03
7	-2-naphthol	uois	777	E-0	7944	4.08E	440	576	200	0.16	244	983	825	3343	804	644
		e	959	6	801	-09	777	769	974	7269	909	195	74	525	614	809
							8	9	3	215	6	3			5	3
cg29		turq	0.53				0.41	0.00	0.14		0.39	0.00	0.04			0.64
3	4-Guanidinobutyric acid	uois	772	3.23	0.50	1.61E	174	059	940	0.23	526	102	417	0.72	0.05	803
		e	529	E-0	3916	-05	930	283	237	1192	717	100	667	4682	723	661
			5	6	339		2	1	4	169	1	5	3	446	773	3
cg25		turq	0.53	3.50	0.61		0.20	0.09	0.44	0.00	0.16	0.18	0.54		0.53	3.45
5	Acetyl-L-carnitine	uois	607	E-0	9356	2.96E	663	597	164	0205	585	322	425	2.32	635	E-0
		e	776	6	909	-08	984	365	204	499	337	409	116	E-06	038	6

						3	4	8		9	1	6		2	
cg71	5-(6-hydroxy-6-methyloct	turq	0.53			0.28	0.02	0.38		0.45	0.00	0.43		0.01	0.90
6	yl)-2,5-dihydrofuran-2-on	uois	529	3.64	0.42	0.000			0.00				0.00		
	e	e	274	E-0	5722	36569			1639	361	013	762		433	906
			4	6	826	8			379	404	070	658		304	083
							9	4	3	2	5	1		8	1
cg17	Tretinoin	turq	-0.5			-0.4	0.00	-0.2		-0.2	0.07	-0.2		-0.0	0.53
0		uois	349	3.70	-0.44	0.000			0.06				0.06		
		e	648	E-0	5298	17928			2186	204	529	274		780	357
			75	6	763	9			398	474	598	451		043	904
							82	4	73	75	7	49		39	8
cg35	(5Z)-3-aminonon-5-enoic	turq	0.53			0.45	0.00	0.22		0.06	0.60	0.26		-0.0	
3	acid	uois	130	4.44	0.49				0.06				0.02		0.72
		e	216	E-0	7220	2.17E	551	012	751	474	551	758		447	135
			6	6	374	-05	136	147	388	538	470	410		328	665
							4	2	8	745	3	1	8	27	
cg45	Ureidoisobutyric Acid	turq	0.52			0.23	0.05	0.31		0.19	0.11	0.41		0.21	0.07
4		uois	685	5.51	0.70				0.01				0.00		
		e	596	E-0	2146	5.06E	434	823	312	789	120	727		737	955
			7	6	458	-11	360	750	592	647	570	268		736	539
							5	9	4	08	1	9		6	3

cg29 2	Hexanoylcarnitine	turq	0.52				0.26		0.56		0.34	0.00	0.55		0.32	0.00	
		uois	253	6.78	0.58		2.62E	635	0.03								
		e	959	E-0	4136		-07	709	063								
			7	6	436			3	605							5	6
cg34 0	2,4-Dimethylbenzaldehyd e	turq	0.52				0.62		0.13			0.02	0.40		-0.0	0.87	
		uois	172	7.05	0.33	0.005		1.96			0.27	0.27			0.00		
		e	561	E-0	9157	34017		E-0			8252	781			0721	194	699
			1	6	059	3		7	8		734	745			628	215	371
cg84 4	Cytidine-5'-monophosph ate	turq	0.51				0.19	0.11			0.39	0.00	0.40		0.11	0.34	
		uois	956	7.81	0.66		1.57E	725	239	0.34	0.00			0.00		714	890
		e	571	E-0	0745		-09	256	718	254	4871	087	117	058	0859	210	564
			5	6	381			1	3	676	496	8	4	4	368	5	8
cg64 9	2-[(3S)-1-Cyclobutyl-3-py rrolidiny]-1H-imidazo[4, 5-b]pyridine	turq	0.51	8.35	0.37	0.001	0.30	0.01	0.46			0.03			0.00	0.97	
		uois	813	E-0	7812	76289	524	269	155	9.59		0.25	589	0.29	0.01	327	919
		e	47	6	678	8	321	482	347	E-05		878	585	214	7303	323	044
								9	7			621	4	195	071	6	2
cg58	(+/-)-UR-144	turq	0.51	8.37	0.73	2.24E	0.12	0.32	0.18	0.13	0.15	0.22	0.41	0.00	0.15	0.21	

8	N-(4-Hydroxypentyl)	uois	809	E-0	4490	-12	345	337	698	2761	144	481	126	0602	302	993
	metabolite	e	760	6	191		093	713	002	168	097	626	877	54	958	349
			2				8	7	2			9	8		9	6
			0.51				0.19	0.10	0.38		0.53		0.23		0.00	0.95
cg50	Guanosine	turq	726	8.70	0.62		944	837	982	0.00	459	3.77	008	0.06	737	310
6	monophosphate	uois	648	E-0	3109	2.31E	579	876	375	1214	019	E-0	455	3095	981	413
		e	6	6	157	-08	8	7	1	475	6	6	3	024	1	5
			0.51				0.18	0.14	0.07		0.14	0.25	0.18		0.19	0.11
cg40	N-(5-acetamidopentyl)ace	turq	644	9.04	0.67		217	318	315	0.55	083	937	681	0.13	543	580
4	tamide	uois	520	E-0	8412	3.88E	666	999	437	9397	002	042	413	3111	940	500
		e	8	6	081	-10	6	1	8	455	2	6	2	491	6	9
			0.50				0.32	0.00	0.20			0.11	0.17		0.16	0.17
cg26	Dodecanedioic acid	turq	798	1.34	0.49		858	706	810	0.09	0.19	961	577	0.15	841	644
		uois	130	E-0	7973	2.10E	937	620	012	3596	345	995	590	8025	915	582
		e	5	5	971	-05	8	1	8	743	758	5	6	274	2	9
cg63	1-[4-(1-adamantyl)phenox	turq	0.50	1.60	0.76	1.18E	0.16	0.18	0.28	0.02	0.08	0.50	0.21	0.08	0.08	0.51
9	y]-3-piperidinopropan-2-	uois	397	E-0	1217	-13	350	959	040	2582	272	901	172	7892	094	819



	ol hydrochloride	e	198	5	275		476	202	123	623	665	851	676	964	996	062
			4				3	7	1		1	3	1		5	7
			0.50				0.19	0.11	0.09		0.07	0.54	0.13		0.21	0.08
cg33	N-(5-Aminopentyl)aceta	turq	368	1.62	0.59	1.36E	418	821	466	0.44	597	429	286	0.28	057	967
5	mide	uois	551	E-0	5125	-07	215	418	187	9623	879	001	440	7557	155	929
		e	7	5	771		3	3	5	364	8	8	6	286	9	7
			0.49				0.13	0.27	0.13		0.32	0.00	0.42		0.07	0.55
cg83	Taurine	turq	962	1.95	0.82	2.82E	522	898	938	0.26	786	720	687	0.00	363	683
4		uois	157	E-0	1716	-17	943	578	413	4342	641	041	745	0351	168	053
		e	1	5	676		1	3	9	732	4	1	3	057	2	2
			0.49				0.62		0.14		0.21	0.07	0.08		0.05	0.66
cg67	Kojic acid	turq	828	2.07	0.32	0.007	392	2.18	912	0.23	881	754	850	0.47	490	151
9		uois	305	E-0	5561	64329	336	E-0	082	2082	314	021	499	9772	032	603
		e	9	5	61	8	7	8	8	489	4	4	9	466	6	7
			0.49	2.42	0.48		0.42	0.00	0.15	0.20	0.04	0.72	0.11	0.37	0.09	0.43
cg16	Hexanoylglycine	uois	471	E-0	2550	4.08E	015	044	847	3760	347	891	058	6725	713	781
4		e	017	5	259	-05	298	446	544	536	021	440	493	225	445	757

			7			6	6			8	1		6	2		
cg64	Nicorandil	turq	0.49			0.22	0.06	0.61		0.24	0.04	0.39		0.08	0.48	
5		uois	294	2.61	0.51	1.17E	966	359	463	4.02	363	869	930	0.00	761	420
		e	208	E-0	0904	-05	189	439	205	E-08	005	464	691	0895	759	493
			3	5	873		9	1	7		9	9	6	924	1	6
cg53	1,3,5-Trimethylpyrazole	turq	0.48			0.14	0.24	0.26		0.12	0.30	0.48		0.37		
6		uois	782	3.26	0.58	2.05E	453	691	042	0.03	795	589	956	3.02	194	0.00
		e	621	E-0	8321	-07	686	313	901	4694	547	682	589	E-05	982	210
			4	5	886		8	6	7	849	3	4	4		3	401
cg41	Maltotetraose	turq	0.48			0.25		0.13		0.44	0.00	0.42		0.08	0.50	
9		uois	773	3.27	0.57	5.85E	039	0.04	877	0.26	695	016	416	0.00	425	120
		e	974	E-0	0039	-07	109	258	442	6458	216	847	288	0386	216	989
			3	5	731		3	615	8	598	2	7	4	363	1	6
cg60	(5S)-5-hydroxy-1,7-diphenylheptan-3-one	turq	0.48			0.42	0.00	-0.0		0.21	0.07	0.17		-0.1	0.23	
4		uois	518	3.65	0.30	0.013	983	031	624	0.61	891	739	210	0.16	476	671
		e	273	E-0	2733	48484	972	590	381	8452	765	512	372	7033	688	175
			2	5	26	6	8	9	23	832	9	2	8	81	41	7

cg48 9	PC (2:0/16:2)	turq	-0.4				0.00			-0.2		-0.0		-0.0	0.68	
		uois	803	4.48	-0.48	3.00E	-0.3	528	-0.1	0.12	571	0.03	129	0.91	512	298
		e	203	E-0	9714	-05	395	884	893	7913	962	709	803	7611	160	049
			56	5	919		152	4	104	288	2	101	62	84	39	4
cg74 0	Isobutyryl carnitine	turq	0.47				0.57		0.13	0.16	0.19	0.14		-0.0	0.87	
		uois	715	5.10	0.39	0.001	035	5.75	0.28	308	264	196	270	0.25	202	171
		e	865	E-0	0347	19450	372	E-0	6742	496	259	443	3019	625	151	
			4	5	936	2	4	7	5	258	8	2	1	142	29	3
cg85 2	Orsellinic acid ethyl ester	turq	0.47				0.10	0.40		0.35	0.00	0.23		0.12	0.31	
		uois	680	5.18	0.58	2.64E	321	954	0.21	0.08	597	335	143	0.06	503	714
		e	424	E-0	4018	-07	274	812	232	6984	368	237	071	1525	925	236
			9	5	988		9	3	113	847	1	4	5	588	2	1
cg69 2	Psychosine	turq	-0.4				-0.2	0.04	-0.2	-0.1		-0.2		-0.2	0.03	
		uois	760	5.35	-0.59	1.62E	477	490	644	0.03	569	0.20	107	0.08	670	016
		e	265	E-0	2299	-07	325	798	743	1879	368	824	247	9440	885	399
			57	5	548		65	7	23	609	4	161	29	816	94	3
cg25	Proline	turq	0.47	5.56	0.55	1.37E	0.17	0.16	0.48	3.92	0.12	0.31	0.20	0.10	0.17	0.16

3		uois	508	E-0	4398	-06	144	869	349	E-05	467	855	212	3621	338	384
		e	756	5	673		098	898	408		651	941	526	184	750	260
			1				6	7	9		8		1		5	5
			0.47				0.07		0.38		0.07	0.54	0.62		0.40	0.00
cg13	16-Hydroxyhexadecanoic	turq	484	5.62	0.60		0.07		0.38		0.07	0.54	0.62		0.40	0.00
2	acid	uois	092	E-0	2362	8.76E	269		500	0.00	609	369	334	2.27	726	068
		e	1	5	08	-08	897		421	1412	026	788	151	E-08	073	932
			1				3		182	72	5	7	3		7	7
			0.47				0.31	0.01	0.02		0.12		-0.0			0.52
cg65	1H-indol-3-yl(pyridin-2-y	turq	355	5.92	0.47		0.31	0.01	0.02		0.12		-0.0			0.52
1	l)methanol	uois	206	E-0	8489	4.83E	317	045	399	0.84	336		068	0.95	0.07	858
		e	3	5	132	-05	530	527	771	8321	571	371	506	6463	895	041
			3				4	6	9	195	3	387	43	411	647	4
			0.46				0.02	0.82	0.27		0.18	0.13			0.37	0.00
cg10	N-Acetyl-DL-norvaline	turq	860	7.24	0.73		0.02	0.82	0.27		0.18	0.13			0.37	0.00
7		uois	136	E-0	7939	1.56E	832	138	346	0.02	602	479	0.32	0.00	208	209
		e	6	5	493	-12	540	404	105	6303	207	377	477	7799	392	559
			6				7	1	9	952	8	8	627	559	3	1
cg35	ethyl	turq	0.46	7.31	0.45	0.000	0.39	0.00	0.19	0.10	0.03	0.77	0.23	0.05	-0.0	0.52
6	2-amino-3-phenylpropan	uois	836	E-0	7968	11040	997	087	937	8513	650	102	716	5189	803	108

	oate hydrochloride	e	682	5	612	6	421	665	135	316	875	947	526	755	932	166	
			5				9	2	5		6	7			63	1	
			0.46				0.32	0.00	0.07		0.06	0.60	0.03		0.07	0.53	
cg54	4-morpholinobenzoic acid	turq	732	7.62	0.41	0.000	059	867	335	0.55	475	546	947	0.75	728	739	
7		uois	986	E-0	6548	50336	661	909	576	8313	352	926	203	3013	091	251	
		e	7	5	991	5	3	2	6	712	3	6	1	753	4	8	
		turq	0.46	8.01	0.43	0.000	0.31	0.00	0.09	0.47	0.14	0.24	0.11	0.35	0.17	0.16	
cg83	Nicotinuric Acid	uois	610	E-0	6569	24768	733	942	011	1799	514	490	527	6702	489	016	
3		e	442	5	648	8	540	427	225	774	542	781	303	361	027	428	
		turq	0.46	8.08	0.66		0.09	0.46		0.40	0.00	0.15	0.22	0.20	0.09	0.11	0.33
		uois	588	E-0	7979	8.95E	052	977		0658	097	626	594	7121	979	803	
cg16	2-[2-(5-bromo-2-pyridyl)diaz-1-enyl]-5-(diethylamino)phenol	e	190	5	919	-10	220	774	861	0658	558	088	468	615	229	330	
9		turq	1				2	7	827	738	4	5	3	615	6	3	
		uois	0.46	8.25	0.40	0.000	0.36	0.00	0.26	0.02	0.24	0.04	0.22	0.07	0.03	0.77	
cg42	3-hydroxy-3-methylpentanedioic acid	e	534	E-0	6420	70890	481	259	887	9037	734	525	114	4360	505	991	
1		turq	292	5	337	3	933	774	393	432	802	23	009	649	393	931	

							9	7	5				8		2	2
cg37	R-1	Methanandamide	turq	0.46			0.13	0.28	0.36		0.07	0.54	0.44		0.08	0.48
6	phosphate		uois	304	9.04	0.58	2.58E	283	765	392	0.00	550	683	361	757	439
			e	564	E-0	4416	-07	662	898	490	2666	045	460	655	975	438
				4	5	039		7	3	8	47	8	4	3	94	8
				4				7	3	8		8	4	3		7
cg61	3-hydroxyquinuclidine-3-		turq	0.46	0.00		0.11	0.36	0.21			0.11			0.18	0.14
6	carbonitrile		uois	014	010	0.60	7.02E	381	286	964	0.07	0.19	0.28	0.02	118	541
	hydrochloride		e	673	138	5907	-08	438	084	278	6394	817	556	572	0041	432
				1	1	615		9	1	9	405	924	556	245	073	432
				1	1			9	1	9		6	245	073	2	5
cg65	NPH		turq	0.45	0.00		0.33	0.00	0.30		0.01	0.34	0.00	0.17	-0.0	0.96
2			uois	772	011	0.33	0.006	219	642	864	0.01	605	442	560	0.15	0.96
			e	695	145	1641	52347	358	931	220	1688	708	479	185	8443	051
				1	2	514	6	8	6	4	928	1	8	8	966	265
				1	2			8	6	4		1	8	8		34
cg71	Testosterone		turq	0.45	0.00		0.50					0.31	0.00	0.10	0.11	0.36
0			uois	624	011	0.37	0.001	239	1.72	0.25	0.03	572	981	765	0.38	454
			e	805	805	9145	69263	438	E-0	946	5396	066	343	098	9593	866
				5	2	762	2	8	5	375	398	8	6	4	473	275
				5	2			8	5	375	398	8	6	4		4

cg40 1	APK	turq uois e	0.45	0.00			0.04	0.70	0.11		0.23	0.05	0.16		0.50		
			580	012	0.73				0.33					0.18	0.08		
			799	008	0253	3.45E	794	224	989	7609		666	572	469	6346	293	796
			9	4	93	-12	612	342	677	063		072	497	459	346	161	578
						9	1	9		8	5	8			4		
cg54 0	2-(4-aminophenoxy)isoph thalonitrile	turq uois e	0.45	0.00			0.38	0.00	0.10		0.10	0.38	0.07		-0.0	0.94	
			408	012	0.37	0.001			0.41						0.57		
			684	834	5049	91692	105	159	217	4310		962	088	008	6013	090	258
			2	6	82	1	436	640	229	514		948	740	930	493	369	975
						6	7	1		4	5	7		55	6		
cg57 8	Deflazacort	turq uois e	0.45	0.00			0.15	0.21	0.14		0.07	0.55	0.33		0.04	0.72	
			119	014	0.38	0.001			0.23						0.00		
			112	343	8511	26579	301	999	665	9981		375	618	669	5704	342	919
			9	4	713	4	043	191	496	759		136	777	587	946	356	412
						8	4	8		3	1	3		3	7		
cg32 2	Adenosine 5'-monophosphate	turq uois e	0.44	0.00			0.08	0.47	0.14		0.17	0.15	0.23		0.13	0.26	
			793	016	0.76				0.24						0.05		
			170	235	2910	9.70E	974	362	369	9719		701	506	521	7285	779	989
			1	8	539	-14	317	426	085	554		824	043	180	535	211	137
						2	6	7		5	1	6		4	5		
cg42	Cadaverine	turq	0.44	0.00	0.61	3.12E	0.13	0.29	0.05	0.67	0.05	0.65	0.11	0.34	0.07	0.55	

8		uois	767	016	8549	-08	053	616	258	4974	634	315	920	0426	346	771
		e	999	391	903		474	848	498	698	755	711	449	234	725	419
			2				2		6		9	1			3	1
		turq	0.44	0.00			0.17	0.15	0.31		0.10	0.42	0.49		0.22	0.06
cg82	N-Acetyl-aspartic acid	uois	703	016	057	5.84E	799	275	936	0.00	011	380	044	2.91	898	440
6		e	146	797	0069	-07	441	988	217	8954	921	112	453	E-05	420	173
			3	4	49		7	4	3	883	2	3	6		8	1
		turq	0.44	0.00			0.10	0.38		0.00	0.30	0.01	0.25		0.20	0.10
cg24	9-HpOTrE	uois	566	017	062	1.72E	952	135	531	0735	737	205	476	0.03	087	581
0		e	323	685	7483	-08	199	737	804	345	075	681	109	8985	585	901
			9	2	956		5	2			2	4	2	427	8	9
		turq	0.44	0.00			-0.0	0.63		0.03	0.15	0.22	0.25		0.17	0.15
cg34	L-Valine	uois	017	021	075	1.99E	599	237	441	9263	277	069	044	0.04	833	195
5		e	851	693	6746	-13	782	483	161	778	955	703	186	2542	838	532
			8	9	282		83	4			3	7	1	796	5	4
cg49	UMP	turq	0.43	0.00	0.66	1.57E	0.10	0.41	0.33	0.00	0.28	0.01	0.52	5.06	0.05	0.68
0		uois	887	022	0742	-09	259	235	686	5678	732	932	861	E-06	099	425



		e	584	761	092		774	928	934	535	846	360	245		858	545	
			7				2	5	3		5	9	6		2	3	
cg24	3'-Adenosine monophosphate (3'-AMP)	turq	0.43	0.00			0.02	0.86			0.27	0.02	0.18		0.05	0.63	
			707	024	0.76		6.36E	085	799	0.19	0.11	209	709	790	0.13	949	511
		uois			6449					610	4547				0829		
		e	119	318			-14	437	745			205	603	069		618	852
			4	9	432			3	2	343	89	5	1	3	565	9	8
cg39 9	N,N-Dimethylaniline	turq	0.43	0.00			0.25	0.03	0.25		0.19	0.11	0.23		0.00		
			438	026	0.46		7.57E	945	540	811	0.03	524	617	059	0.06	731	0.95
		uois			7500						6395	643	231	887	2491	415	352
		e	417	819	491		-05	234	475	649	295	643	231	887	626	415	091
			8	9				5	7	5		6	3	5		2	
cg24 5	2-Hydroxycinnamic acid	turq	0.43					0.79	0.28			0.35	0.60		0.56		
			023	0.00	0.60		9.95E	0.03			0.01	0.11				7.92	
		uois		031	0298			288	323	652	0.01	0.11	677	187	9.02	455	E-0
		e	953	142	244		-08	336	487	252	9680	525	091	988	E-08	795	7
			5						2	3			6	9		4	
cg26 7	DL-Arginine	turq	0.42	0.00	0.51		0.17	0.16	0.29	0.01	0.14	0.24	0.52		0.48	3.53	
		uois			1492		1.14E	284	518	460	6339	497	545	964	4.81	591	E-0
		e	982	011	9		-05	653	184	909	516	927	418	366	E-06	171	5

			7	5			2		9		6	6	1		6	
cg34	Glycylproline	turq	0.41	0.00			-0.0	0.45			0.04	0.72	0.19		0.12	0.31
6		uois	801	047	0.66	9.45E	942	143	0.17	0.16	471	144	892	0.10	461	881
		e	724	856	7284	-10	854	606	093	9965	816	425	574	9321	114	522
			3	2	751		36	7	992	994	6	2	5	411	5	7
cg26	DL-Carnitine	turq	0.41	0.00			0.07	0.54	0.45		0.27	0.02	0.44		0.51	
1		uois	446	054	0.59	1.80E	504	926	891	0.00	798	382	805	0.00	156	1.13
		e	773	053	0508	-07	518	180	622	0106	868	207	742	0161	417	E-0
			3	1	226		5	8	3	393	4	4	6	587	6	5
cg81	Uric acid	turq	0.41	0.00			0.27	0.02	0.24		0.08	0.49	0.16		0.08	0.51
6		uois	422	054	0.47	5.51E	648	462	472	0.04	483	826	691	0.18	118	699
		e	923	494	5325	-05	459	358	896	7655	065	507	319	0401	150	059
			2	6	442		2	8	1	568	1	1	1	797	6	1
cg14	2,3-Dinor-8-epi-prostagla ndin F2α	turq	0.41	0.00			0.24	0.05	0.17		0.27		0.27		0.16	0.19
8		uois	112	060	0.43	0.000	158	067	545	0.15	144	0.02	608	0.02	196	384
		e	229	552	0503	30848	434	845	885	8788	314	747	369	4841	789	428
			1	8	776	5	3	3	5	587	7	844	3	033	5	9

cg12	Azelaic acid	turq	0.40	0.00		0.20	0.09	0.08		0.17	0.15	0.08		0.25	0.03	
					0.48					0.47				0.48		
		uois	848	066		3.20E	493	880	859		674	569	650		897	575
		e	958	158		-05	493	813	754		9311	958	807	534	831	365
		1	4			5	4	4		466	2	6	8	3	1	
cg38 7	Nitrosoheptamethylenei mine	turq	0.40	0.00		0.10	0.39	0.25		0.07	0.55	0.13		0.35	0.00	
					0.57					0.03				0.28		
		uois	771	067		3.80E	666	399	854		379	597	352		139	381
		e	815	887		-07	100	370	539		6074	071	651	446	582	477
		3	9			6	2	7		78	3	6	3	5	6	
cg38 4	Trigonelline	turq	0.40	0.00		0.15	0.20	0.42		0.11	0.37	0.10		0.14	0.23	
					0.46					0.00				0.40		
		uois	689	069		7.30E	731	713	797		211	010	501		756	703
		e	21	785		-05	346	833	428		0337	781	507	943	752	714
			3			1	1	7		647	6	2	7	495	2	6
cg31 3	Hypoxanthine	turq	0.40	0.00		-0.0	0.57	0.08		0.13	0.26	0.35		0.14	0.25	
					0.81					0.51				0.00		
		uois	688	069		4.80E	703	439	142		990	253	077		314	154
		e	756	795		-17	855	768	475		5731	644	919	076	280	912
		8	8			44	2	4		398	6	9	6	114	9	9
cg24	N-Benzylformamide	turq	0.40	0.00	0.62	1.47E	0.01	0.89	0.27	0.02	0.13	0.27	0.63	1.12	0.49	2.69

9		uois	141	083	9802	-08	593	892	931	3132	668	377	371	E-08	228	E-0
		e	701	626	234		833	640	836	008	990	824	050		484	5
			4				5	7	5		4	9	3		1	
		turq	0.40	0.00			-0.0	0.59	0.06		0.11		0.36		0.15	0.21
cg32	Inosine	uois	086	085	6082	3.21E	669	308	660	5175	485	845	102	0.00	341	874
0		e	976	137	651	-16	823	508	466	618	732	091	877	2900	979	562
			6	8			47	8	9		6		7	255	1	6
		turq	0.39	0.00			0.10	0.41	0.24		0.11	0.36	0.40		0.33	0.00
cg89	PC (5:0/13:1)	uois	920	089	3152	1.05E	284	121	581	6644	406	179	960	0.00	984	524
		e	515	889	896	-05	732	709	705	709	645	200	023	0637	738	162
			4	7			9	4	1		1	2	1	385	8	4
		turq	0.39	0.00			0.20		0.03		0.04	0.74	0.11			0.04
cg72	3-((5-Phenyloxazol-2-yl)amino)benzotrile	uois	718	095	0005	0.000	450	0.09	701	0.76	130	193	421	0.36	0.25	127
9		e	406	980	944	44674	687	952	787	7925	505	427	251	1173	194	579
			8	9		1	9	994	5	312	7	5	3	525	471	9
cg13	13,14-dihydro-15-keto-tetranor Prostaglandin F1 $\beta$	turq	0.39	0.00	0.70	5.29E	-0.0	0.58	0.22	0.06	0.21	0.08	0.21	0.08	0.22	0.06
7		uois	520	102	1657	-11	679	763	554	8627	398	448	255	6630	872	470





cg25 7	Coumarin	turq	0.37	0.00		-0.0	0.86	0.27		0.10	0.40	0.57		0.58		
		uois	290	204	0.56	8.84E	218	169	394	0.02	403	580	135	5.44	768	2.13
		e	333	479	2539	-07	596	568	914	6026	557	448	510	E-07	098	E-0
			2	5	39		19	1	7	319	7	4	9		2	7
cg34 9	Isoquinoline	turq	0.36	0.00		0.12	0.30	0.01		0.23	0.06	-0.0		-0.0	0.69	
		uois	786	237	0.40	0.000	896	206	620	0.89	059	249	233	0.85	493	397
		e	890	516	9147	64714	555	268	989	7213	205	959	898	2119	461	242
			3	5	936	1	6	9	6	547	7	4	31	565	15	2
cg82 5	Prostaglandin A3	turq	0.36	0.00	0.67	-0.0	0.83	0.05		0.07	0.55	0.30		0.16		
		uois	067	292	0548	7.31E	254	940	652	0.65	340	805	625	0.01	354	0.18
		e	641	991	627	-10	274	142	589	2129	351	689	700	2387	326	948
			2				25	9	5	986	6	7	7	259	4	637
cg52 2	DPK	turq	0.35	0.00	0.47	0.02	0.86	0.37		0.05	0.68	0.21		0.11	0.35	
		uois	327	361	0.47	5.28E	206	042	262	0.00	087	495	128	0.08	490	826
		e	968	804	6355	-05	271	350	332	2062	913	616	024	8580	166	417
			9	9	724		8	4	9	027	2	7	7	074	2	3
cg27	Methyl indole-3-acetate	turq	0.35	0.00	0.66	1.13E	-0.1	0.40	0.06	0.59	0.07	0.52	0.13	0.26	0.27	0.02

6		uois	122	383	4979	-09	036	773	607	8138	975	442	949	3973	099	774
		e	019	359	141		117	046	033	881	161	386	085	571	410	572
			9	1			09	7	3		4	7	3		3	
		turq	0.35	0.00			-0.0	0.83	0.09		0.07	0.56	0.26		0.11	0.34
cg21	19(R)-Hydroxy	uois	040	392	5109	5.78E	257	710	458	9970	292	063	234	3335	730	825
2	prostaglandin F2 $\alpha$	e	584	191	649	-12	953	891	979	168	441	617	621	802	038	026
			7	3			96	2	1		6	8	2		9	7
		turq	0.34	0.00	0.38	0.001	0.16	0.19	0.16	0.17	0.10	0.38	0.26	0.03	0.19	0.11
cg94	Traumatic acid	uois	728	427	4279	44491	000	936	819	7031	907	331	257	3173	576	518
		e	317	754	727	5	931	186	475	268	403	969	961	427	535	661
			1				3	7			9	6	6	427	6	661
		turq	0.34	0.00	0.52		0.09	0.45	0.09	0.43	0.04	0.70	0.08	0.50	0.04	0.69
cg52	P-Toluenesulfonic acid	uois	262	486	2031	6.95E	383	362	827	2446	787	265	396	2665	832	997
		e	048	171	022	-06	188	546	169	648	579	988	681	754	915	704
			7	9			1	9	3		2	8	8	754	9	2
cg37	Epigallocatechin	turq	0.34	0.00	0.73	2.82E	-0.0	0.85	0.13	0.28	0.22	0.06	0.45	0.00	0.06	0.60
0		uois	175	497	2248	-12	228	530	369	4511	557	858	012	0149	398	977



		e	226	796	216		797	913	927	904	545	872	085	412	283	762
			1				89		3		1	2	1		9	8
		turq	0.33	0.00			0.07	0.55	0.08		0.10	0.39	0.54		0.18	0.13
cg93	Chenodeoxycholic Acid	uois	569	585	0.53	3.72E	449	218	131	0.51	579	787	507	2.22	622	436
		e	882	885	4888	-06	768	755	275	6310	290	629	069	E-06	089	999
			3	2	07		6	1	8	961	1	5	8		7	4
		turq	0.33	0.00			-0.0	0.79	0.03		0.03	0.76	0.19		0.10	0.38
cg71	ELK	uois	334	623	0.73	2.67E	329	259	375	0.78	810	128	889	0.10	763	964
9		e	068	748	2788	-12	867	944	953	7852	851	780	827	9371	911	604
			6	1	491		18	3	7	569	8	3	8	373	6	7
		turq	0.32	0.00			0.07	0.57	0.01		0.04	0.74	0.12		0.08	0.50
cg19	diethyl	uois	968	686	0.58	3.07E	067	280	486	0.90	097	392	432	0.31	308	716
1	2-[(2-morpholinoanilino)	e	521	695	1404	-07	858	138	827	5680	527	379	986	9917	769	482
	methylenidene]malonate		1	2	552		1	5	4	177	9	9	4	421	8	1
		turq	0.32	0.00	0.67		-0.0	0.57	0.08	0.51	0.07	0.53	0.47		0.10	0.38
cg54	DLK	uois	346	806	4172	5.47E	710	065	200	2720	718	789	067	6.66	817	729
3		e	674	633	735	-10	734	367	758	643	626	245	860	E-05	015	757

			9			41	6	6		2	8	3		7	6	
cg73 2	4-(anilinomethylidene)-3- methyl-4,5-dihydroisoxaz ol-5-one	turq uois e	0.32	0.00		0.18	0.14	0.06		0.12	0.30			0.03	0.77	
			308	814	0.40	0.000	358	007	333	0.61	881	264	0.07	0.54	576	558
			674	523	2240	81397	292	522	692	3398	278	058	507	9088	331	097
			2	1	106	9	8	2	7	685	3	2	76	822	5	2
cg81 2	L-Saccharopine	turq uois e	0.31	0.01		0.03	0.79	0.18		-0.0		0.43		0.09	0.43	
			440	014	0.56		268	447	673	0.13	370	0.76	640	0.00	684	919
			431	095	1271	9.47E	226	155	730	3273	673	762	182	0249	446	311
			7	4	19	-07	5	2	4	973	79	367	9	211	3	8
cg10 6	Thr-Leu	turq uois e	0.31	0.01		-0.1	0.16	0.10		0.06	0.61	0.44		0.12	0.32	
			407	022	0.75		731	440	173	0.41	348	255	346	0.00	362	269
			345	475	2904	3.07E	584	856	883	6303	691	702	544	0192	295	817
			1	5	383	-13	95	5	4	932	3	4	1	02	1	4
cg64 1	VLK	turq uois e	0.31	0.01		-0.0	0.47			0.05	0.68	0.35		0.08	0.50	
			185	080	0.71		899	259		0.91	032	823	085	0.00	335	578
			217	309	4805	1.57E	507	756	339	4960	062	599	229	3873	668	605
			2	5	609	-11	73	8	957	773	1	2	5	272	2	6

cg46 4	FLK	turq	0.30	0.01		-0.0	0.68	0.43		0.05	0.65	0.35		0.24	0.04	
		uois	981	135	0.54	1.88E	510	384	927	0.00	677	071	723	0.00	514	726
		e	898	713	8309	-06	691	181	144	0224	108	885	802	3233	224	952
			3	7	677		16	1	4	32	8	4	3	779	1	5
cg46 7	LLK	turq	0.30	0.01		-0.1	0.33	0.00		0.05	0.66	0.36		0.08	0.49	
		uois	841	175	0.73	1.67E	204	533	910	0.94	443	419	705	0.00	528	593
		e	505	392	7284	-12	588	269	171	2179	751	792	450	2432	986	386
			5	9	16		23	9	1	075	4	6	4	873	1	1
cg60 8	12,13-EODE	turq	0.30	0.01		0.01	0.89			0.14	0.24	0.12		0.00	0.95	
		uois	721	210	0.55	1.16E	669	414	0.01	0.92	523	460	016	0.33	734	333
		e	530	247	7543	-06	723	083	139	7659	674	782	744	6511	274	940
			1	3	731		8	6	276	683	9	9	9	601	6	8
cg36 8	Ala-Ile	turq	0.30	0.01		-0.0	0.84	0.01		0.04	0.70	0.24		0.08		
		uois	310	336	0.64	5.10E	250	192	260	0.91	737	563	211	0.05	951	0.47
		e	293	589	4873	-09	225	528	877	9962	356	611	317	0159	713	474
			2	1	491		69	9	4	504	1	5	7	396	6	349
cg68	SLK	turq	0.29	0.01	0.68	2.80E	-0.0	0.75	0.02	0.86	0.04	0.70	0.26	0.03	0.09	0.43



		e	908	413	587		976	528	996	837	641	956	406	979	690	597
			7	6			7		9		3	1	3		87	4
			0.26	0.03				0.11	0.02			0.23	0.12		0.10	0.41
cg10	trans-10-Heptadecenoic	turq			0.53		-0.1			0.86	0.14			0.30		
1	acid	uois	429	199	9854	2.90E	949	666	148	4040	683	938	698	9626	278	149
		e	851	785	705	-06	893	314	542	476	982	325	063	919	598	766
			7	5				3	5			7	3		3	3
			0.26	0.03			-0.0		-0.0		0.03	0.77	0.12		0.10	0.40
cg84	1,3-Dimethyluracil	turq			0.50			0.99		0.90				0.33		
8		uois	017	487	5684	1.48E	001	905	154	1921	578	545	074	4187	384	668
		e	355	938	399	-05	491	636	636	357	441	203	241	778	254	092
			3	1			82	147	83		5	9	5		6	6
				0.03			-0.0	0.51	-0.0		0.03	0.77	0.24		0.07	0.54
cg53	3-Amino-4-methylpentan	turq	0.25	942	0.60		5.92E	825	006	223	0.85	632	213	195	0.05	553
2	oic acid	uois	420	729	8601	-08	239	066	153	8841	744	580	920	0310	008	681
		e	726	8	219		65	3	06	833	8	3	1	075	9	2
			0.25	0.03	0.56		-0.0	0.98	0.03	0.78	0.06	0.61	0.19	0.11	0.07	0.57
cg58	KKK	uois	388	968	8443	6.39E	016	955	399	6381	261	745	591	4905	081	206
3		e	653	507	963	-07	432	25	927	586	465	877	380	816	339	769

			9	7		02	4		2	5	2		5		
cg38	tert-Butyl	turq	0.25	0.04	0.61	-0.1	-0.0	0.76	0.02	0.87	0.32	0.00	0.04	0.73	
8	N-[1-(aminocarbonyl)-3-methylbutyl]carbamate	uoise	068	233	7529	3.33E-08	750	378	051	012	729	7308	318	062	
			042	955	533		420	116	465	897	296	449	552	205	
				8			39	06	5	6	6		7	4	
cg24	Chenodeoxycholic acid-3-beta-D-glucuronide	turq	0.24	0.04	0.43	0.02	0.86	0.06	0.07	0.54	0.35	0.00	0.22	0.06	
4		uoise	869	405	8085	0.000	060	956	638	211	502	3443	938	392	
			868	245	144	23432	494	236	850	511	426	956	170	719	
			2	4			5	8	6	1	3		6	2	
cg74	Choline bitartrate	turq	0.24	0.05	0.67	-0.1	0.11	0.00	0.99	0.05	0.68	0.02	0.09	0.44	
5		uoise	117	108	0096	7.58E-10	961	449	041	093	462	077	461	984	
			176	644	3		329	223	064	557	506	250	657	128	
			3	9			55	8	1		1	3	5	9	
cg82	Guanosine-3',5'-cyclic monophosphate	turq	0.23	0.05	0.47	-0.0	0.74	0.02	0.83	0.02	0.86	0.28	0.04	0.71	
9		uoise	862	366	6709	5.20E-05	404	718	095	736	656	0.01	547	690	
			275	706	86		347	823	822	521	488	264	887	338	
			4	7			73	6	9	6	8	946	1	3	

cg15 3	7-Ketodeoxycholic acid	turq	0.23	0.05			0.08	0.52	0.04		0.07		0.16		0.27		
		uois	636	603	0.37	0.001					0.73		0.55		0.18	0.02	
		e	739	808	8960	70225					0904		273		8988	757	
			3	8	23	8			211	378	842		715		546	502	194
			3	8			2	3	5		3		2		6		
cg30	3-Indoxyl sulphate	turq	0.23	0.05			0.09	0.43	0.03		0.00	0.98	0.08		0.15	0.20	
		uois	630	610	0.38	0.001					0.75				0.52		
		e	664	310	5797	37822					5500				0548	723	736
			7	8	157	3			062	579	168		95		985	361	590
			7	8			8	3	4		6	4	2		2	1	
cg40 6	VLH	turq	0.22	0.06			0.04	0.71	0.05		0.11	0.34	0.19		0.03	0.75	
		uois	749	620	0.37	0.001					0.67				0.11		
		e	792	128	7641	77212					2844				4292	963	200
			8	1	15	7			931	847	024		605		031	691	922
			8	1			4	8	8		6	1	1		8	6	
cg29 7	N8-Acetylspermidine	turq	0.22	0.06			-0.1	0.25	0.14		0.21	0.07	0.32		0.24	0.04	
		uois	708	671	0.40	0.000					0.25				0.00		
		e	111	314	8514	66102					3815				7424	372	860
			3	7	635	9			564	331	780		047		484	229	365
			3	7			55	8	4		7	4	3		9	6	
cg30	Pilocarpine	turq	0.22	0.07	0.39	0.001	0.06	0.58	0.02	0.82	0.02	0.85	0.13	0.27	0.04	0.73	

8		uois	324	158	5305	01973	859	418	785	4302	235	860	639	4808	282	278	
		e	105	005	976	2	725	350	496	88	235	987	942	798	527	487	
			8				4	2	7		6	7	3		1	8	
		turq		0.08			-0.1	0.15	0.02		0.05	0.68	0.14			0.12	
cg19		uois	0.21		0.60					0.86				0.23		0.32	
5	(+/-)8(9)-DiHET	e	533	248	8970	5.78E	779	275	172	2565	045	746	851	4018	376	214	
			915	726	273	-08	984	037	085	063	265	013	106	861	346	422	
				3			74	7	7		1	1	2		5		
		turq	0.21	0.08			-0.1	0.12	0.13		0.17	0.16	0.48			0.44	0.00
cg24		uois	329	551	5327	5.93E	901	622	735	1429	363	323	607	3.51	380	018	
7	Choline	e	572	181	27	-06	373	568	475	246	241	893	210	E-05	009	963	
			8	2			5	7	5		9	1	5		1	6	
		turq	0.21	0.08			-0.0	0.84				0.94				0.28	0.02
cg83	2-Hydroxy-2-methylbuta	uois	323	560	0983	59990	241	707		0.14	0.24	0.00	0.04	0.71		248	155
	noic acid	e	266	652	24	2	975	310	477	6123	915	186	566	5796	607	602	
			5	8			82	9	616	276	1	649	457	365	1	7	
cg74	pyridine-2-carbaldehyde	turq	0.20	0.09	0.34	0.004	0.05	0.65	0.03	0.80	-0.0	0.90	0.24	0.05	0.01	0.87	
8	2-(2-quinolyl)hydrazone	uois	479	904	7711	22713	684	031	070	6652	144	806	060	1651	909	903	



		e	366	590	493		071	836	588	147	901	829	469	593	721	236
			1	4			4	4	9		59	7	7		1	
		turq	0.19	0.12			-0.0	0.90	-0.1		0.18	0.14	0.02		-0.0	0.84
cg59	L-5-Hydroxytryptophan	uois	169	310	0.46	7.83E	155	114	079	0.38	031	740	122	0.86	247	346
7		e	096	099	6672	-05	870	284	960	8066	043	328	880	5649	750	878
			3	7	629		44	5	08	804	8	9	2	217	99	6
		turq	0.18	0.12	0.55		-0.1	0.16	0.09	0.43	0.01	0.88	0.41		0.06	0.62
cg44	2-Phenylacetamide	uois	850	958	5130	1.32E	718	767	759	5620	814	503	264	0.00	151	363
7		e	015	336	525	-06	494	115	880	026	281	568	141	0575	924	814
				8			94	7	8		7	3	1	181	5	2
		turq	0.18	0.14	0.38	0.001	0.05	0.65	0.12	0.31	0.01	0.88	0.05		-0.0	0.92
cg30	2-Isopropylaniline	uois	142	487	1949	55299	545	829	539	5769	821	455	054	0.68	124	091
0		e	570	441	528	3	747	310	164	573	960	242	404	6923	576	888
			5	9			5	5	7		6	4	6	25	23	2
		turq	0.18	0.14	0.58		-0.2	0.03	-0.0	0.67	-0.0	0.95	0.35	0.00	0.03	0.77
cg83	Feruloyl Putrescine	uois	046	705	2510	2.88E	668	028	528	3608	078	002	803	3161	571	588
1		e	129	929	328	-07	972	690	192	43	656	049	294	14	308	794

		9	8		1	5	2		73	6	3		4	7		
cg13 8	Prostaglandin D1	turq	0.17	0.16		-0.1	0.25	-0.0		0.00	0.97	0.05		0.02	0.81	
				0.53					0.83				0.64			
		uois	372	300	4.17E	422	471	258		340	834	726		894	757	
		e	897	137	2564	-06	001	724	430	6811	654	312	880		013	361
			9	4	163		84	6	81	921	6	4	2		4	7
cg76 1	Clofencet-potassium	turq	0.17	0.16		-0.0	0.97	0.04		0.02	0.81	0.10		0.05	0.65	
				0.39					0.71				0.39			
		uois	324	418	0.001	031	988	619		974	260	642		684	030	
		e	890	495	5517	01281	632	949	335	2647	269	521	736		217	993
			9	2	77		55	8	1	317	7	8	7		44	9
cg17	4-Methylhippuric acid	turq		0.18		0.00	0.96	-0.0		0.04	0.74	0.06			0.54	
			0.16	554	0.35	0.003	617	078	149	0.90	099	382	690	0.59	0.07	827
		uois	499	189	0856	87276	084	002	300	5289	147	603	891	3491	522	726
		e	181	1	935	9	3	9	79	908	8	3	8	276	974	2
cg82 7	gamma-Glutamylleucine	turq	0.15	0.20		-0.3	0.00	-0.0		0.04	0.71	0.34		0.09		
				0.59					0.57				0.00		0.45	
		uois	968	028	1.11E	173	941	708		639	145	623		4403	319	671
		e	503	610	8531	-07	536	996	625	1800	375	507	113		463	
			4	4	03		08	6	4	338	9	7	4		624	144

cg82 8	L-Leucyl-L-alanine Hydrate	turq uois e	0.15	0.20			-0.2	0.01	-0.0		-0.0	0.92	0.27		0.03	0.79		
			731	714	0.59		1.79E	866	964	774	0.53		112	862	552	0.02	243	597
			067	647	0641		-07	106	154	380	6563		404	412	603	5146	815	343
			7	4	436			12	5	34	139		72	4	8	199	7	3
cg28 8	2,6-Xylidine	turq uois e	0.15				-0.3	0.00	-0.0		0.27	0.02	0.12		0.10	0.39		
			537	0.21	0.42	0.000		480	419	098	0.93		022	821	941	0.30	558	880
			180	287	7374	34492		280	020	973	7134		231	021	218	0377	601	489
			8	077	358	3		97	7	05	673		8	5	8	338	6	7
cg43 4	Spiculisporic Acid	turq uois e	0.15				-0.2	0.06	0.16		-0.0	0.96	0.28		0.04	0.73		
			160	0.22	0.42	0.000		249	936	152	0.19		058	288	278	0.02	326	013
			173	431	2208	41375		619	501	201	5090		397	253	874	1410	625	766
			5	873	657	3		2	8	2	67		97	2	9	335	8	2
cg14 4	15(R),19(R)-Hydroxy prostaglandin F2 $\alpha$	turq uois e	0.15	0.22			-0.2	0.04	0.00			0.61	0.17		0.10	0.42		
			041	801	0.55		1.66E	500	291	317	0.97	0.06		138	963	0.14	042	239
			207	873	0758		-06	115	146	093	9840	369		269	956	8940	272	031
			3	7	15			08	8	2	7	633		2	9	271	7	7
cg13	(+/-)5(6)-DiHET	turq	0.14	0.23	0.49	2.13E	-0.2	0.02	0.10	0.38	0.08	0.50	0.57	5.86	0.11	0.36		

1		uois	768	665	7577	-05	783	364	932	2236	257	981	001	E-07	320	545
		e	551	823	988		260	535	119	25	087	935	885		484	351
			6	4			59	6	6		9	2	8		3	4
			0.14	0.24			-0.3	0.01	-0.0		-0.0	0.94			0.08	0.49
cg14	Tyrosylalanine	turq			0.61					0.64			0.18	0.12		
3		uois	377	942		5.08E	071	211	570		081	791			450	991
		e	863	736	1006	-08	608	850	625	9043	981	097	928	7966	578	768
			5	7	747		45	3	41	075	17	4	461	193	9	8
			0.14	0.25			-0.1	0.21	0.09		0.18	0.13	0.07			
cg19	Pentadecanoic Acid	turq			0.34	0.004				0.47				0.53	0.17	0.16
7		uois	303	190			551	352	036		462	780	815		334	394
		e	593	697	3480	74896	520	648	205	0567	418	189	022	2811	667	532
			4	3	361	6	7	9	1	126	9	8	1	667	532	675
			0.13	0.27			-0.3	0.00	-0.0			0.56	0.29		-0.0	0.88
cg30	$\alpha$ -Aspartylphenylalanine	turq			0.53					0.53	0.07			0.01		
7		uois	612	580		3.96E	177	932	782			599	549		181	484
		e	015	199	3584	-06	466	733	796	2131	193	690	745	6004	724	890
			6	9	206		51	6	12	487	198	9	8	019	95	8
cg83	Asp-Phe methyl ester	turq	0.13	0.28	0.60	7.85E	-0.2	0.03	0.03	0.80	0.04	0.74	0.32	0.00	-0.0	0.81
8		uois	357	495	4113	-08	649	156	121	3488	025	825	685	7391	292	594

		e	795	310	246		465	380	853	125	902	062	95	053	031	485	
			8	1			41	9	6		7	7			05	3	
			0.13	0.29			-0.3	0.00	0.06		0.09	0.43	0.23		0.09	0.44	
cg11	Prostaglandin F1 $\alpha$	turq			0.52					0.61				0.06			
4		uois	109	408		6.66E	325	637	382		801	365	003		617	237	
		e		412	562		-06	270	301	001		411	984	981		608	267
				1	5			73	9	8		549			736		
			turq					-0.3	0.00	-0.0		-0.0	0.69	0.02			0.08
cg10	2-Phenylpropionic acid	uois	220	833	4097	5.79E	561	333	043		491	534	464		0.84	0.21	
4		e		162	562	507	-05	475	584	094		2605		4276	362	502	
				4				38	1	25		107	141	040	558		348
			turq		0.10	0.40		-0.3	0.00			0.38	0.05	0.68	0.24		0.03
cg67		Loxoprofen	uois	531	001		1.90E	373	561		0.38	0.91	473	280		0.04	485
4	e			788	028	788	-05	077	226		083	6398		9488	145	115	
				6	7			98	1			348	664	608	341		882
			turq		0.09	0.44	0.51				0.89	0.03	0.80	0.40	0.00	0.02	0.83
cg96	Lipoxin B4		uois	473	928	2856	1.07E	-0.2	0.03	0.01	0.89	0.03	0.80	0.40	0.00	0.02	0.83
		e		323	021	373	-05	638	232	624	7015	118	369	207	0818	689	024
							076	992	135	18	575	034	022	534	791	821	

			2			9	4	1		7	1	2			9	
cg97	15(R),19(R)-Hydroxy prostaglandin F1 $\alpha$	turq uois e	0.09	0.46		-0.3				0.05		0.36		0.05	0.63	
			177	361	0.48	3.61E	709	0.00	0.03	0.80	408	0.66	828	0.00	983	319
			733	603	5390	-05	987	216	121	3540	288	625	655	2346	489	037
			9	7	37		27	46		784	9	574	7	047	4	9
cg17 3	Biocytin	turq uois e	0.08	0.51		-0.1	0.24	-0.0		0.02	0.85	0.20		0.09	0.44	
			154	512	0.32	0.008	456	311	005	0.99	300	453	440	0.09	569	465
			115	939	0977	59558	917	710	398	6567	320	712	589	9700	825	367
			4	1	137	5	36	1	44	577	5	7	4	823	2	7
cg36 5	Microcystin RR	turq uois e	-0.0			-0.2	0.01	-0.0		-0.0	0.69	0.18		-0.0	0.99	
			811	0.51	0.34	0.004	870	945	894	0.47	484	922	588	0.13	005	668
			787	700	2316	90214	387	140	671	4991	556	901	468	5087	208	807
			13	506	454	8	15	7	06	407	76	4	9	21	92	7
cg17 8	CaUMYL-PICA N-pentanoic metabolite	turq uois e	-0.0	0.54		-0.4		-0.0		-0.0	0.57	0.09		0.04	0.71	
			764	162	0.33	0.005	940	2.49	963	0.44	700	620	087	0.46	630	198
			804	761	6378	75361	364	E-0	613	1489	549	129	497	8041	401	888
			5	7	03	8	61	5	73	964	01	6	6	463	5	4

cg47 4	6-methoxy-4-(trifluorome thyl)nicotinamide	turq uois e	0.07	0.55			-0.3	0.00	0.00		-0.0	0.71	-0.0		0.07	0.53	
			431	317	0.42		0.000	237	800	943	0.94	462	228	158	0.89	715	808
			303	600	4190		38599	705	374	927	0038	545	290	211	9665	014	326
			1	1	351			39	8	1	515	94	6	87	456	9	2
cg35	Guanosine	turq uois e	0.07	0.55			-0.4	0.00	0.04		0.05	0.64	0.43			0.08	
			421	370	0.45	0.000		246	037	854	0.69	731	757	874	0.00	0.21	341
			500	105	2479	13653		798	939	429	8705	743	892	829	0228	470	377
			9	3	415	1		95	9	4	233	4	5	5	681	698	8
cg68 3	N-acetyl-L-ornithine	turq uois e	-0.0	0.55			-0.4		-0.1		-0.0	0.68	0.15		-0.0	0.77	
			740	439	0.30	0.014		626	9.19	211	0.33	516	063	948	0.20	361	299
			849	833	0227	31534		492	E-0	905	2383	157	956	608	0854	871	192
			02	2	932	3		69	5	4	626	01	7	8	635	95	2
cg77 2	Thymopentin	turq uois e	0.06	0.59			-0.2	0.09	-0.0		-0.0	0.97	0.14		0.03	0.77	
			681	401	0.43	0.000		051	845	337	0.78	045	096	271	0.25	574	570
			396	668	7867	23620		478	070	906	7661	670	812	274	2991	324	361
			9	7	191	1		07	1	13	849	43	2	4	21	6	7
cg49	2-(2-amino-3-methylbuta	turq	0.05	0.65	0.48	4.37E	-0.4	0.00	-0.0	0.44	-0.0	0.77	0.25	0.04	0.02	0.84	

2	namido)-3-phenylpropan	uois	661	159	0908	-05	359	025	961	2367	359	432	215	1101	515	110
	oic acid	e	936	190	166		190	363	772	272	685	722	487	133	427	403
			5	8			57	9	22		28	9	1		9	7
			0.05	0.65			-0.1	0.11	-0.0		0.01	0.92	0.19		0.16	0.17
cg11	Gamma-Glu-Leu	turq	568	697	0.37	0.002	973	217	419	0.73	150	691	037	0.12	988	265
3		uois	524	730	2502	06952	707	776	912	7799	976	873	123	5751	419	830
		e	6	2	118	7	43	8	86	711	9	3	7	466	2	2
		turq	0.02	0.86	0.44	0.000	-0.3	0.00	-0.1	0.34	-0.0	0.75	0.19	0.12	0.00	0.97
cg32	Glycyl-L-leucine	uois	126	540	8873	15666	803	163	177	6195	399	008	200	2469	408	401
5		e	785	438	825	5	296	235	977	855	557	520	846	747	818	101
		turq	2	1			05	2	62		24	4	4		6	5
		turq	-0.0	0.89	0.39	0.000	-0.4	3.76	-0.0	0.43	-0.0	0.88	0.10	0.39	0.06	0.58
cg20	Ala-trp	uois	168	302	7478	95071	844	E-0	967	9741	177	777	539	9651	899	200
5		e	745	316	31	5	752	5	290	356	075	564	767	383	368	767
		turq	64	6			55		25		68	7	2			2
		turq	-0.0	0.97	0.37	0.001	-0.4	0.00	-0.0	0.59	-0.0	0.74	0.19	0.11	0.08	0.50
cg75	N1-isopropyl-2-(phenylth	turq	-0.0	0.97	0.37	0.001	-0.4	0.00	-0.0	0.59	-0.0	0.74	0.19	0.11	0.08	0.50
1	io)benzamide	uois	034	798	8208	74179	407	021	672	1789	410	348	383	8885	405	220



		e	627	594	024	1	744	221	167	429	481	409	557	002	683	626	
			43				63	2	21		39	5	7			9	
			0.68				0.58				0.26	0.03			0.10	0.41	
cg50	Methyl dihydrojasmonate	yell	546	2.16	0.54		2.73E	609	2.34	0.64			0.14	0.25	132	820	
4		ow	683	E-1	1053		-06	574	E-0	128	6.59	516	142	067	9902	699	302
			2	0	779			6	7	246		5	3	449	234	9	8
			0.66					0.37	0.00	0.63		0.27	0.02	0.42		0.50	
cg47	3-Methoxy prostaglandin	yell	779	9.09	0.65		2.86E	110	215	922	7.63	630	472	656	0.00	247	1.71
9	F1α	ow	155	E-1	2773		-09	060	803	631	E-09	501	078	673	0354	366	E-0
			9	0	202			5	6	3		6	9	5	943	2	5
			0.65					0.38	0.00	0.75		0.36	0.00	0.29		0.12	0.32
cg62	Prostaglandin G2	yell	648	2.17	0.64		4.63E	378	146	745	1.83	690	244	540	0.01	233	781
7		ow	804	E-0	6214		-09	926	708	741	E-13	589	353	699	6037	142	822
			7	9	5			8	4	3		7	8	2	912	3	2
			0.58	2.68	0.53			0.40	0.00	0.43	0.00	0.55	1.42	0.35	0.00	0.11	0.33
cg85	11-dehydro Thromboxane	yell	377	E-0	8352		3.13E	293	079	629	0250	374	E-0	635	3316	935	982
3	B2	ow	630	7	644		-06	145	568	304	202	287	6	574	135	298	074

			5				9	2	9		2		6			1	
			0.55				0.23	0.05	0.60		0.35	0.00	0.30		0.42	0.00	
cg47	N-Acetylornithine	yell	643	1.23	0.55		1.03E	824	406	688	6.60	826	314	839	0.01	784	033
8		ow	590	E-0	9708		-06	271	076	129	E-08	008	065	381	1760	134	924
			1	6	316			2	9	1		2	2	4	024	2	7
			0.51				0.28	0.02	0.77		0.39	0.00	0.24		0.05	0.63	
cg16	Octadeca-11E,13E,15Z-tri enoic acid	yell	564	9.39	0.50		1.79E	253	153	263	2.99	931	089	850	0.04	909	742
0		ow	139	E-0	1490		-05	149	410	722	E-14	389	572	133	4226	123	697
			4	6	796			9	7	5		6	1	5	111	8	2
			0.50				0.41		0.48		0.34	0.00	0.09				0.25
cg30	6-Methylnicotinamide	yell	878	1.29	0.38	0.001		312	0.00	284	4.02	084	510	592	0.44	0.14	079
3		ow	607	E-0	9758	21696		787	056	564	E-05	641	184	986	3547	336	088
			4	5	934	6		4	576	7		9	6	6	226	961	3
			0.50				0.37	0.00	0.71		0.30	0.01	0.18		0.13	0.27	
cg78	(2E)-6-hydroxy-2-methyl- 6-(4-methylphenyl)hept-2 -enoic acid	yell	725	1.38	0.36	0.002		208	209	117	2.21	719	210	220	0.14	572	720
2		ow	881	E-0	4295	63782		763	535	866	E-11	177	939	125	3135	675	517
			6	5	144	9		4	8	8		5	6	9	076	2	4

cg55	(+/-)-9-HpODE	yell ow	0.50	1.78	0.55		0.20	0.09	0.72		0.27	0.02	0.23	0.05	0.29	0.01
			169	E-0	3144	1.46E	813	354	990	3.58	693	438	688	5481	525	609
			679	5	435	-06	047	783	111	E-12	615	059	977	475	991	314
			3				7	7	1		7	3	5		5	5
cg83 7	Phenylpyruvic acid	yell ow	0.49	2.08	0.42	0.000	0.20	0.10	0.51		0.20	0.09	0.06	0.58	0.33	0.00
			815	E-0	3953	38921	013	714	462	9.84	611	683	770	9111	848	543
			815	5	709	4	308	264	601	E-06	497	941	187	446	473	771
			4				3	9	2		5	6	7		9	8
cg11 5	Fumaric acid	yell ow	0.37	0.00			0.19	0.12	0.87		0.16	0.19	0.17	0.15	0.17	0.17
			997	165	0.31	0.009	004	640	131	1.86	032	846	899	0423	034	147
			736	008	7831	30754	972	370	374	E-21	399	789	709	36	543	824
			4	3	091		5	1	1		3	9	7		5	
cg30 2	1-Methyladenosine	yell ow	0.36	0.00			0.24	0.04	0.38		0.29	0.01	0.20	0.09	-0.0	0.97
			951	226	0.33	0.005	523	718	029	0.00	037	802	856	0.09	046	054
			870	199	7293	61441	085	708	100	1634	455	288	013	2857	337	399
			4	4	497	2	6	5	6	287	6	4	6	613	91	9
cg78	(S)-2-Hydroxybutanoicaci	yell	0.34	0.00	0.27	0.024	0.20	0.09	0.73	1.43	0.09	0.44	0.20	0.09	0.10	0.39

	d	ow	382	470	6743	48404	607	690	875	E-12	565	488	895	2220	710	199
			594	430	455		680	261	656		051	191	910	266	901	879
			3	5			1	9	7		5	2	8			5
			0.30	0.01			0.07	0.53	0.74		0.07	0.53	0.20		0.08	0.49
cg74	N'1-(4-chlorobenzoyl)-2-a	yell	213	367	0.33	0.006	860	041	120	1.11	762	556	264	0.10	629	083
7	minobenzene-1-carbohyd	ow	431	951	1312	58007	562	962	839	E-12	815	038	590	2715	762	785
	razide		1	6	997	9	3	8	5		8	9	1	845	7	4
			0.30	0.01			0.13	0.28	0.91		0.13	0.26	0.10			0.37
cg63	L-Malate	yell	177	379	0.26	0.030	377	423	523	5.86	859	708	196	0.41	0.10	939
		ow	584	718	6038	84344	641	159	585	E-27	566	111	962	5241	997	450
			584	1	69	9	4	4	5		2	6	1	882	146	9
			0.29	0.01			0.02	0.84	0.64		0.40	0.00	0.17			0.09
cg16	N6-Succinyl Adenosine	yell	345	678	0.44	0.000	482	315	584	4.75	767	067	010	0.17	0.20	851
8		ow	637	383	7545	16474	513	666	205	E-09	258	991	291	2097	511	400
			3	2	08	8	4	9	4		2	3	5	974	006	8
cg27	2-(acetylamino)-3-(1H-ind	yell	0.28	0.01	0.25	0.038	0.08	0.51	0.61	3.42	0.09	0.43	0.02	0.85	0.13	0.27
	ol-3-yl)propanoic acid	ow	831	889	5960	04250	166	448	711	E-08	710	793	218	9687	711	228

			448	406	558	6	494	957	369		918	733	030	124	223	453	
			2	9				9	8		8	1	5		4	5	
			0.28				0.12	0.30	0.57		0.18	0.13	0.38		0.23	0.05	
cg12	cis-Aconitic acid	yell	223	0.02	0.32	0.008	708	922	116	5.50	643	391	830	0.00	419	840	
9		ow	697	167	3489	06172	515	559	314	E-07	427	630	629	1274	404	278	
				5	656	049	8	1	5	7		4	2	6	004	8	4
				0.27	0.02			0.11	0.37	0.62		0.19	0.11	0.23		0.20	0.09
cg25		Creatinine	yell	499	543	0.29	0.017	144	298	267	2.37	654	371	881	0.05	882	243
0	ow		923	738	1736	46588	795	931	436	E-08	436	893	790	3465	668	142	
				6	5	751	6	3	5	5		3	3	6	811	6	4
				0.26	0.03			0.14	0.24	0.69		0.08	0.50	0.02			0.43
cg72	Cnidioside A		yell	289	295	0.20	0.107	514	492	839	7.08	370	402	237	0.85	0.09	826
1		ow	654	400	0122	16124	086	277	180	E-11	131	236	959	8439	703	610	
				3	4	698	6	8	1	6		1	6	1	377	984	7
				0.26	0.03	0.25		0.10	0.41	0.90		0.07	0.53	0.37	0.00	0.05	0.68
cg20		D-(-)-Quinic acid	yell	068	451	6920	0.037	146	757	437	2.34	750	619	710	1801	097	440
	ow		331	197	486	3016	392	108	969	E-25	697	943	100	472	345	285	

			1	2			1	6	8		2	9	4		1	6
			0.25	0.04			0.09	0.45	0.93		0.03	0.80	0.06		0.07	0.57
cg73	(-)-Epigallocatechin	yell	312	030	0.22	0.070	353	505	521	1.47	149	180	664	0.59	086	177
3		ow	140	569	3841	80091	668	358	332	E-30	092	823	365	4959	640	929
					448									685		
			2	5			2	4	4		5	8	2		8	6
			0.25	0.04			0.13				0.08	0.51	0.32		0.36	0.00
cg66	D-threo-Isocitric acid	yell	185	135	0.24	0.047	000	0.29	0.49		2.74	087	855	043	802	236
4		ow	442	102	4934	46364	355	815	182	E-05	881	968	354	8715	675	412
					078	7		527	688					094		
			4	5			3				2	4	2		8	1
			0.25				0.14		0.47		0.09	0.46	0.26		0.21	0.08
cg50	2,5-Furandicarboxylic acid	yell	122	0.04	0.25	0.042	471	0.24	987	4.56	134	575	943	0.02	684	031
1		ow	957	187	0386	58977	130	633	521	E-05	041	599	462	8691	457	367
					855	2		717						012		
			1				8		6		1	9	6		9	4
			0.24	0.04			0.09	0.42	0.85		0.08	0.48	0.09		0.02	0.85
cg60	Quercitrin	yell	577	668	0.16	0.173	958	630	635	4.93	742	516	999	0.42	225	924
9		ow	028	779	9387	93553	145	732	379	E-20	500	974	593	4374	053	735
					554	8								909		
			1	3			7	6	1		2	5	5		7	6

			0.21	0.07			0.10	0.41	0.94		0.06		0.01		0.02	0.85
cg57	3,4-Dihydroxybenzaldehy	yell	840	810	0.15	0.200	250	279	675	3.30	852	822	0.58	0.88	279	582
0	de	ow	507	878	9709	21739	227	666	893	E-33	691	456	993	4509	695	736
			3	5	105	3	3	6	7		9		993	939	3	8
			0.20	0.10				0.51			0.04	0.70	0.00		-0.0	
cg44	Quercetin	yell	053	641	0.12	0.319	0.08	391	0.88	1.64	790	250	893	0.94	077	0.95
9		ow	845	869	4418	56803	177	712	130	E-22	180	586	789	3218	148	097
			3	9	96	8	576	4	601		3	3	8	001	38	773
			0.19	0.11				0.60	0.91		0.05	0.67			0.00	0.99
cg32	Quercetin-3 $\beta$ -D-glucoside	yell	767	161	0.14	0.254	0.06	371	932	1.29	251	539	0.04	0.74	125	203
3		ow	620	217	2384	09455	506	780	015	E-27	381	006	154	0513	266	544
			7	9	825	2	751	7	9		1	5	072	564	5	7
			0.19	0.11			0.07	0.53			0.04	0.72	-0.0		-0.0	0.95
cg51	Avicularin	yell	458	744	0.12	0.332	774	496	0.85	9.43	436	358	009	0.99	070	505
4		ow	273	244	1138	59116	075	694	317	E-20	008	507	811	3761	717	974
			5	9	914		8	4	803		5	9	97	423	4	1
cg78	Phlorizin	yell	0.19	0.11	0.10	0.385	0.09	0.43	0.53	3.97	0.03	0.76	0.02	0.84	-0.0	0.99

1		ow	346	960	8490	88465	846	153	352	E-06	822	060	452	5060	006	610
			732	096	573	9	465	902	964		141	167	007	02	122	737
			5	2			9	1	6		8	9	5		25	1
			0.19	0.12			0.11	0.37	0.40		0.00	0.93	0.04		0.00	0.96
cg81	S-Adenosyl-L-methionine	yell			0.23					0.00				0.72		
5		ow	105	438	5752	0.056	019	842	944	0640	953	944	342	9205	596	205
			040	209	919	69863	328	801	274	767	312	342	160	857	994	592
			1	9			6	1	8		6	7	7		3	8
			0.18	0.14			0.05				0.05	0.64	0.00		0.00	
cg41	Catechin	yell	107	566	7030	0.272	322	122	489	9.64	749	655	496	8414	998	0.93
		ow	729	092	654	8	782	756	293	E-33	521	851	895	507	977	654
			8	4			8				3	7	2		2	855
				0.15			0.02	0.82	0.93			0.63	0.01		0.04	0.74
cg25	4-oxo-4,5,6,7-tetrahydrob enzo[b]furan-3-carboxylic acid	yell	0.17	237	0.15	0.222	733	753	237	5.56	0.05	290	322	0.91	136	154
		ow	815	288	2315	11903	496	198	426	E-30	988	159	868	6041	882	978
			97	3	505		6	1	4		566	1	6	333	1	2
cg32	Phloretin	yell	0.17	0.16	0.13	0.266	0.04	0.71	0.94	1.16	0.05	0.67	0.01	0.91	0.00	0.94
8		ow	391	254	8780	43811	557	631	456	E-32	302	238	289	8161	848	609



			308	915	315	3	677	964	976		859	805	340	852	415	621	
			2	3			9	9	5		4	1	7		5	2	
			0.16	0.18				0.77			0.03	0.76	0.04				
cg31	Kuromanin	yell	566	371	0.15		0.03	395	0.93		1.03	781	307	201	0.73	0.04	0.74
1		ow	922	774	5875	0.211	602	440	101		E-29	517	137	508	7656	095	406
				1	6	398		957	8	021		7	6	5	456	256	092
				0.16	0.18			0.02	0.86			0.04	0.71	0.03		0.02	
cg54		5-[(E)-2-(3,5-dihydroxyphenyl)ethenyl]-2-methoxybenzene-1,3-diol	yell	455	671	0.14	0.237	075	861	0.94		1.47	656	045	109	0.80	639
2		ow	855	541	7384	62612	614	368	414		E-32	242	221	829	4229	415	338
			855	9	37	9	3	7	727			2	9	8	947	6	143
			0.14	0.24	0.12	0.298	0.01	0.92	0.93		0.05	0.66	0.00		0.01	0.87	
cg18	Chlorogenic acid	yell	654	035	9854	71299	106	975	477	1.82	403	652	630	0.95	922	823	
		ow	066	237	854	8	191	503	014		E-30	732	031	516	9927	452	202
				2			8	4	3			5	7	1	035	7	2
cg19	Trehalose 6-phosphate	yell	245	0.14	0.25	0.12	0.324	0.00	0.97	0.92	1.87	0.05	0.68	-0.0	0.97	0.03	0.75
2		ow	665	258	104	4	431	44	584		E-29	496	074	120	0682	933	384
				665	258	104	4	431	44	584			496	074	120	033	504

		6	3			7	2		9	6	67		1			
		0.12	0.30			-0.0	0.92	0.61		-0.0		0.51		0.02	0.81	
cg10	2-Isopropylmalate	yell	792	601	0.18	0.144				0.92						
3		ow	440	523	1513	67745	123	166	294	4.49	116	414	1.01	893	758	
					179	3	398	442	597	E-08	910	577	060	E-05	841	426
		9	5			07	1	5		6	085	4		5	7	
		0.12	0.33			0.02	0.86	0.55		0.03	0.76	0.14		0.34	0.00	
cg13	Citric acid	yell	020	637	0.13	0.294							0.23			
		ow	054	754	0855	97138	119	586	796	1.13	679	929	876	3203	162	499
					924	1	421	609	545	E-06	234	994	745	315	547	513
		9	7			3	4	8		6	8	1		3	9	
		0.08	0.48			-0.1	0.30	0.45		-0.0	0.99	0.03		0.06	0.62	
cg47	Anthranilic acid	yell	791	270	0.16	0.174			0.00				0.79			
7		ow	793	235	9357	01242	285	353	823	0109	011	274	291	3023	162	304
					741	8	754	972	343	271	417	081	779	136	372	760
		3	1			59	5	4		22	3	8		8	9	
		-0.0	0.71			-0.1	0.41	0.84		-0.0	0.97	-0.0		-0.0	0.75	
cg49	PC (16:2e/22:6)	yell	461	304	-0.03	0.788							0.67			
6		ow	269	241	3689	28512	021	448	235	7.70	034	803	531	1626	387	722
					063	6	349	197	664	E-19	554	234	592	737	767	916
		63	9			61	6	1		42	4	82		98	3	

