## Sheet1
| Table S6. Classification of clusters. Annotated metabolites were clustered using hierarchical clustering. Selected clusters were classified based upon the metabolites within. Cluster's average Pearson's correlation and the number of metabolites within each cluster were reported. Factor loadings identified the weight that each metabolite holds in their cluster. AC, acylcarnitine; BCAA, branched chain amino acid; Cer, ceramide; DG, diglyceride; DiC, dicarboxylic group; diOH, di-hydroxyl group; FA, fatty acid; keto, ketone; LC, long chain; LysoPA, lysophosphatidic acid; LysoPC, lysophosphatidylcholine; LysoPE, lysophosphatidylethanolamine; MC, medium chain; OH, hydroxyl group; PA, phosphatidic acid; PC, phosphatidylcholine; PE, phosphatidylethanolamine; PG, phosphatidylglycerol; PI, phosphatidylinositol; PS, phosphatidylserine; SM, sphingomyelin; StdErr, standard error; TG, triglyceride; VLC, very long chain. | Unnamed: 1 | Unnamed: 2 | Unnamed: 3 | Unnamed: 4 | Unnamed: 5 | Unnamed: 6 | Unnamed: 7 | Unnamed: 8 |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Cluster Number | Cluster Classification | Average Pearson's correlation | Number of Metabolites | Metabolite | Factor Loading | StdErr | z-value | unadjusted p-value |
| 1 | LC and VLC-FA (DiC),VLC-FA, PC/PE | 0.48773 | 17 | FA 18:0 (DiC) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:0 (OH) | 1.124 | 0.157 | 7.171 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:1 (DiC) | 1.222 | 0.161 | 7.567 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:1 (DiC) | 1.221 | 0.161 | 7.567 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:2 (DiC) | 1.286 | 0.165 | 7.814 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:5 | 1.339 | 0.167 | 8.011 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | estradiol valerate | 1.037 | 0.153 | 6.775 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PE-Cer d36:1 | 0.942 | 0.149 | 6.318 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:0/PE 37:0 | 0.959 | 0.15 | 6.415 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:5/PE 39:5 | 1.133 | 0.157 | 7.219 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 27:2 (DiC) | 1.162 | 0.159 | 7.326 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 28:6 | 1.34 | 0.167 | 8.015 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 28:0 | 1.489 | 0.175 | 8.528 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:3 | 1.508 | 0.176 | 8.572 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 25:0 | 1.415 | 0.171 | 8.269 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PE-Cer d34:2 | 1.324 | 0.166 | 7.993 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 28:5 | 1.364 | 0.168 | 8.095 | <0.0001 |
| 2 | LC-FA | 0.839359 | 16 | FA 14:0 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:0 | 1.02 | 0.028 | 35.896 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 17:2 (DiC) | 0.97 | 0.035 | 27.506 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:1 | 0.943 | 0.039 | 24.371 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:2 | 0.956 | 0.037 | 25.683 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:3 | 0.953 | 0.037 | 25.49 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 15:0 | 0.909 | 0.042 | 21.804 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:0 | 0.947 | 0.038 | 24.785 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:1 | 1.035 | 0.026 | 39.639 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:2 | 1.029 | 0.027 | 37.87 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:1 | 1.018 | 0.029 | 35.034 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:1 | 0.999 | 0.032 | 31.48 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:0 | 0.981 | 0.034 | 28.644 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:1 | 0.945 | 0.038 | 24.594 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:2 | 0.957 | 0.037 | 26.064 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | phytanate | 0.855 | 0.046 | 18.418 | <0.0001 |
| 3 | LC-FA | 0.76578 | 10 | FA 22:2 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:3 | 1.01 | 0.03 | 33.259 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:5 | 0.954 | 0.038 | 25.348 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:6 | 0.977 | 0.035 | 28.111 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 7-oxo-11-octadecenoic acid | 0.937 | 0.039 | 23.782 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:3 | 0.832 | 0.049 | 16.971 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:4 | 0.852 | 0.047 | 18.051 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 17:1 | 0.809 | 0.051 | 15.964 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:5 | 0.845 | 0.048 | 17.758 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:5 | 0.83 | 0.049 | 16.864 | <0.0001 |
| 4 | Cer | 0.897347 | 14 | Cer 41:0 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:5/PE 39:5 | 0.967 | 0.038 | 25.405 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 35:0 | 0.971 | 0.038 | 25.834 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer d42:1 (2OH) | 1.043 | 0.028 | 37.207 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer d43:1 (2OH) | 1.023 | 0.031 | 33.419 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer t40:0(2OH) | 1.031 | 0.029 | 35.248 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer t41:0(2OH) | 1.01 | 0.032 | 31.211 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer d40:1 (2OH) | 1.02 | 0.032 | 32.363 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 40:0 | 1.02 | 0.031 | 32.612 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer d44:1 (2OH) | 1.016 | 0.032 | 31.728 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer t42:0(2OH) | 1 | 0.034 | 29.248 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PE-Cer d34:1 | 0.992 | 0.035 | 28.145 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer d38:1 (2OH) | 0.916 | 0.043 | 21.175 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer t38:0(2OH) | 0.935 | 0.041 | 22.551 | <0.0001 |
| 5 | TG, Cer | 0.886833 | 6 | TG 52:8 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | TG 50:8 | 0.93 | 0.054 | 17.1 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | TG 49:8 | 0.862 | 0.059 | 14.72 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 42:0 | 1.097 | 0.042 | 26.202 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 43:0 | 1.114 | 0.04 | 27.823 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 44:0 | 1.093 | 0.042 | 25.941 | <0.0001 |
| 6 | VLC-FA, VLC-FA (DiC), VLC-FA (OH) | 0.841398 | 14 | FA 27:0 (OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:2 | 1.006 | 0.04 | 24.977 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 25:0 (OH) | 0.973 | 0.044 | 22.342 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 25:2 | 1 | 0.041 | 24.375 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 30:6 | 0.949 | 0.046 | 20.766 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:0 (DiC) | 0.954 | 0.045 | 21.068 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:1 | 0.972 | 0.044 | 22.257 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:0 (OH) | 0.916 | 0.048 | 18.887 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 20:4 | 0.963 | 0.044 | 21.655 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 28:2 (DiC) | 0.997 | 0.041 | 24.113 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 29:6 | 1.041 | 0.037 | 28.52 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:0 (OH) | 1.032 | 0.038 | 27.476 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 28:1 (DiC) | 0.994 | 0.042 | 23.89 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 30:5 | 1.032 | 0.038 | 27.403 | <0.0001 |
| 7 | LysoPE, FA | 0.844286 | 7 | Cer t34:0(2OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 18:3 | 0.935 | 0.053 | 17.501 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 26:4 | 0.958 | 0.052 | 18.422 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:4 | 0.966 | 0.051 | 18.816 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPE 16:0 | 1.082 | 0.042 | 25.938 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPE 18:0 | 1.099 | 0.04 | 27.394 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPS 21:0 | 1.06 | 0.044 | 24.176 | <0.0001 |
| 8 | LC-FA, odd-chain LC-FA, Cer | 0.292139 | 21 | Cer 37:0 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 38:0 | 1.106 | 0.207 | 5.351 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer t36:0(2OH) | 0.965 | 0.196 | 4.924 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Cer 36:0 | 0.836 | 0.187 | 4.464 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 17:0 | 1.268 | 0.22 | 5.771 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 19:1 | 1.407 | 0.231 | 6.079 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 19:0 | 1.395 | 0.231 | 6.046 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:1 | 1.889 | 0.277 | 6.816 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:2 | 2.058 | 0.294 | 6.998 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 12:0 | 1.656 | 0.254 | 6.51 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:2 | 1.788 | 0.267 | 6.691 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:3 | 1.887 | 0.277 | 6.814 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Keto 18:0 | 1.703 | 0.259 | 6.575 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 21:5 | 0.881 | 0.19 | 4.629 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dihomoursodeoxycholic acid | 0.346 | 0.163 | 2.124 | 0.034 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 24:0 (OH) | 0.422 | 0.166 | 2.546 | 0.011 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:6 | 0.667 | 0.177 | 3.767 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 27:1 (DiC) | 0.489 | 0.169 | 2.903 | 0.004 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3,7-dihydroxy-5-cholestanoic acid | 0.242 | 0.16 | 1.511 | 0.131 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 25:1 | 0.612 | 0.174 | 3.514 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:0 | 0.606 | 0.174 | 3.491 | <0.0001 |
| 9 | bile acids, glucose, PS | 0.231418 | 12 | 1-octadecanoyl-rac-glycerol | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | glucose | 0.407 | 0.81 | 0.502 | 0.615 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | rac-glycerol-1-myristate | 1.358 | 1.261 | 1.077 | 0.281 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | taurocholate | 6.667 | 5.023 | 1.327 | 0.184 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | norhyodeoxycholic acid | 5.97 | 4.51 | 1.324 | 0.186 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | hyodeoxycholic acid | 4.171 | 3.195 | 1.306 | 0.192 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:2/PE 37:2 | 2.838 | 2.243 | 1.265 | 0.206 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 39:6 | 3.298 | 2.568 | 1.284 | 0.199 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 41:6 | 6.107 | 4.61 | 1.325 | 0.185 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 41:7 | 5.606 | 4.242 | 1.321 | 0.186 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:4/PE 39:4 | 3.939 | 3.027 | 1.301 | 0.193 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | traumatin | 2.685 | 2.136 | 1.257 | 0.209 |
| 10 | malate intermediates, PA, MC-FA (DiC) | 0.660153 | 14 | 2-methylmaleate | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | citramalate | 0.979 | 0.143 | 6.84 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 18:3 | 1.214 | 0.153 | 7.955 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 9:0 | 1.191 | 0.151 | 7.892 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:4 | 1.599 | 0.17 | 9.39 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 9,10,13-Trihydroxy-11-octadecenoic acid | 1.599 | 0.17 | 9.391 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PG 31.4 | 1.364 | 0.159 | 8.574 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 20:3 | 1.573 | 0.169 | 9.303 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | cortisol 21-acetate | 1.545 | 0.168 | 9.222 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 7:1 (DiC) | 1.424 | 0.162 | 8.798 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 8:0 (Dic, OH) | 1.658 | 0.173 | 9.569 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 15:4 | 1.628 | 0.172 | 9.484 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-hydroxytryptophan | 1.564 | 0.169 | 9.278 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 13:4 | 1.417 | 0.162 | 8.771 | <0.0001 |
| 11 | Glucose metabolites, BCAA metabolites, xanthine | 0.52474 | 10 | S-3-methyl-2-oxopentanoate | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 4-methyl-2-oxopentanoate | 1.04 | 0.033 | 31.537 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | methyl-acetoacetate | 0.954 | 0.042 | 22.695 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | allose | 0.611 | 0.064 | 9.528 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | glyceraldehyde | 0.612 | 0.064 | 9.538 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | malate | 0.618 | 0.064 | 9.675 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | xanthine | 0.587 | 0.065 | 9.004 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | possible peptide | 0.569 | 0.066 | 8.647 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (HIS TYR) | 0.379 | 0.071 | 5.313 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | diethylstilbestrol | 0.374 | 0.072 | 5.224 | <0.0001 |
| 12 | Glucose metabolites, acetyl-amino acids | 0.444204 | 7 | L-histidine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetyl-D-glucosamine | 1.045 | 0.184 | 5.682 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetyl-DL-serine | 1.818 | 0.252 | 7.228 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3,4-hydroxyphenyl-lactate | 1.152 | 0.191 | 6.017 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 2-deoxy-D-glucose | 1.127 | 0.189 | 5.971 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetylglycine | 1.099 | 0.188 | 5.847 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | D-lyxose | 1.096 | 0.188 | 5.845 | <0.0001 |
| 13 | MC-FA (DiC) | 0.83125 | 5 | FA 11:1 (DiC,OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 4-hydroxyphenylethanol | 0.891 | 0.079 | 11.26 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 10:0 (DiC) | 1.263 | 0.068 | 18.54 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | C8 H12 N6 O2 | 1.261 | 0.068 | 18.506 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | phenylacetic acid | 0.579 | 0.085 | 6.837 | <0.0001 |
| 14 | MC-FA (DiC OH), LC-FA (DiC, OH) | 0.845562 | 15 | C8 H14 O2 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 9:0 (DiC,OH) | 1.038 | 0.076 | 13.647 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 17:0 (DiC,OH) | 1.205 | 0.071 | 16.872 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 10:1 (DiC, OH) | 1.154 | 0.073 | 15.808 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 11:0 (DiC,OH) | 1.235 | 0.07 | 17.561 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 9:1 (DiC) | 1.089 | 0.075 | 14.575 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 20:3 (DiC, diOH) | 1.054 | 0.076 | 13.874 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | porphobilinogen | 1.24 | 0.07 | 17.681 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-methoxytryptophol | 1.253 | 0.07 | 17.962 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | C9 H16 O2 | 1.196 | 0.072 | 16.676 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 8:1 (DiC) | 1.185 | 0.072 | 16.461 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 11:1 (DiC, OH) | 1.19 | 0.072 | 16.549 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | chlorpheniramine | 1.166 | 0.072 | 16.102 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:0 (DiC,OH) | 1.184 | 0.072 | 16.458 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 10:0 (DiC,OH) | 1.213 | 0.071 | 17.147 | <0.0001 |
| 15 | odd-chain MC-FA (DiC) | 0.731602 | 14 | FA 9:0 (DiC) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 11:0 (DiC) | 1.006 | 0.074 | 13.543 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 7:0 (DiC) | 0.959 | 0.076 | 12.692 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3-hydroxybenzyl alcohol | 0.935 | 0.076 | 12.24 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | debrisoquin | 0.753 | 0.081 | 9.318 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 5:0 (DiC) | 0.971 | 0.075 | 12.872 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 6:0 (DiC) | 1.056 | 0.073 | 14.464 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 9:0 (OH) | 0.891 | 0.077 | 11.497 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 13:0 (DiC) | 1.045 | 0.074 | 14.214 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 17-alpha-hydroxyprogesterone | 1.068 | 0.073 | 14.682 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 8:0 (DiC) | 1.23 | 0.066 | 18.543 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | cycloheptanecarboxylic acid | 1.241 | 0.066 | 18.824 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3-methyladipic acid | 1.202 | 0.068 | 17.781 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPA 20.5 | 1.199 | 0.068 | 17.694 | <0.0001 |
| 16 | BCAA, BCAA metabolite, reflect mitochondrial metabolism | 0.250593 | 15 | 3-methoxytyrosine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | thyroxine | 1.54 | 0.298 | 5.172 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | isovalerylcarnitine | 1.229 | 0.262 | 4.689 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 4:0 | 1.061 | 0.245 | 4.338 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 5:1 | 0.985 | 0.237 | 4.154 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | leucine | 1.23 | 0.262 | 4.691 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | glutarylcarnitine | 1.157 | 0.254 | 4.547 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | salsolinol | 1.395 | 0.281 | 4.97 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | methyl-jasmonate | 0.874 | 0.227 | 3.851 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-undecanoylglycine | 0.909 | 0.23 | 3.949 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | alpha-tocopherol | 1.137 | 0.252 | 4.507 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 22:4 | 0.951 | 0.234 | 4.064 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | quinolin-2-ol | 1.402 | 0.281 | 4.981 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 2-deoxyinosine | 0.951 | 0.233 | 4.088 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-cyclohexylformamide | 1.182 | 0.257 | 4.597 | <0.0001 |
| 17 | homocysteine, phenylalanine metabolite | 0.4724 | 5 | S-adenosyl-L-homocysteine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | sphingosine | 0.779 | 0.096 | 8.1 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (glutamate phenylalanine) | 0.6 | 0.092 | 6.526 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | phenylethanolamine | 0.547 | 0.091 | 5.987 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (serine isoleucine/leucine) | 0.516 | 0.091 | 5.693 | <0.0001 |
| 18 | BCAA, BCAA metabolites, aromatic amino acids, methionine | 0.47205 | 20 | isoleucine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | valine | 1.289 | 0.189 | 6.804 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (glutamate isoleucine/leucine) | 1.014 | 0.172 | 5.881 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 3:0 | 0.847 | 0.163 | 5.195 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | tyrosine | 1.451 | 0.201 | 7.23 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | n-gamma-L-glutamyl-L-methionine | 1.333 | 0.192 | 6.934 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | serine | 1.134 | 0.18 | 6.314 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | methionine | 1.027 | 0.173 | 5.932 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | taurolithocholate | 1.193 | 0.183 | 6.513 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 1-methyladenosine | 1.114 | 0.178 | 6.249 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | indolelactic acid | 1.202 | 0.184 | 6.535 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-hydroxy-1,4-naphthoquinone | 1.16 | 0.181 | 6.401 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | pantothenate | 1.092 | 0.177 | 6.169 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 5:0 (OH) | 1.135 | 0.18 | 6.318 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 11:0 | 0.929 | 0.168 | 5.543 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | phenylalanine | 1.997 | 0.242 | 8.24 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | normethanephrine | 1.997 | 0.242 | 8.24 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | L-gamma-glutamyl-L-isoleucine | 1.552 | 0.208 | 7.462 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-methylthioadenosine | 1.45 | 0.2 | 7.232 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | S-Allyl-L-cysteine | 1.132 | 0.178 | 6.363 | <0.0001 |
| 19 | DG, PC/PE, LysoPC | 0.517086 | 32 | DG 35:1 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 36:1 | 1.026 | 0.061 | 16.92 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 35:2 | 1.119 | 0.055 | 20.219 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 34:1 | 1.114 | 0.056 | 20.061 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 34:2 | 1.043 | 0.06 | 17.469 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 34:3 | 1.015 | 0.061 | 16.629 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 35:3 | 1.01 | 0.061 | 16.446 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 32:0 | 0.981 | 0.063 | 15.604 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 32:1 | 1.054 | 0.059 | 17.813 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 33:1 | 0.998 | 0.062 | 16.077 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 38:3 | 0.948 | 0.064 | 14.764 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 38:4 | 0.908 | 0.066 | 13.762 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 36:3 | 0.888 | 0.067 | 13.284 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PE 36:2 | 1.054 | 0.059 | 17.916 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 1-oleoyl-rac-glycerol | 0.735 | 0.072 | 10.164 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 16:1 | 0.773 | 0.071 | 10.855 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 20:3 | 0.608 | 0.076 | 7.996 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 16:0 | 0.678 | 0.074 | 9.152 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 18:0 | 0.658 | 0.075 | 8.822 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 14:0 | 0.808 | 0.07 | 11.568 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPC 15:0 | 0.551 | 0.077 | 7.128 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:2/PE 39:2 | 0.582 | 0.077 | 7.578 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:3/PE 39:3 | 0.686 | 0.074 | 9.269 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 36:1/PE 39:1 | 0.736 | 0.073 | 10.155 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 39:4 | 0.611 | 0.076 | 8.03 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:3/PE 37:3 | 0.643 | 0.075 | 8.555 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 37:6 | 0.632 | 0.075 | 8.368 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:1/PE 37:1 | 0.594 | 0.076 | 7.763 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 40:4/PE 43:4 | 0.602 | 0.076 | 7.891 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 40:5/PE 43:5 | 0.531 | 0.078 | 6.813 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 38:5 | 0.871 | 0.067 | 12.92 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 31:5/PE 34:5 | 0.691 | 0.074 | 9.387 | <0.0001 |
| 20 | DG, PC/PE, PS | 0.48498 | 10 | DG 30:1 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 32:2 | 0.779 | 0.088 | 8.855 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | DG 34:0 | 0.596 | 0.09 | 6.587 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 35:5 | 0.977 | 0.084 | 11.59 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 37:5 | 1.089 | 0.081 | 13.38 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 32:1/PE 35:1 | 1.074 | 0.083 | 12.972 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 35:4 | 0.974 | 0.085 | 11.493 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 32:2/PE 35:2 | 0.681 | 0.089 | 7.635 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 32:4/PE 35:4 | 1.018 | 0.084 | 12.141 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 39:8 | 0.708 | 0.089 | 7.948 | <0.0001 |
| 21 | polar metabolites, urate | 0.207112 | 15 | 2-acetyl-pyrolidine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3-amino-5-hydroxybenzoic acid | 1.994 | 1.015 | 1.965 | 0.049 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | urate | 1.356 | 0.769 | 1.762 | 0.078 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3-aminoisobutanoate | 1.824 | 0.946 | 1.927 | 0.054 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 4-acetamidobutanoate | 2.568 | 1.251 | 2.052 | 0.04 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | pinitol | 6.528 | 2.991 | 2.183 | 0.029 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | methyl beta-D-galactoside | 6.53 | 2.992 | 2.183 | 0.029 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 7:1 | 0.926 | 0.621 | 1.492 | 0.136 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 8:2 | 0.868 | 0.606 | 1.432 | 0.152 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | m-hydroxymandelic acid | 1.455 | 0.806 | 1.806 | 0.071 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d36:1 | 0.443 | 0.505 | 0.877 | 0.38 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (tyrosine proline) | 0.528 | 0.52 | 1.017 | 0.309 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 1,3,7-trimethyluric acid | 0.168 | 0.47 | 0.358 | 0.72 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | C16 Sphinganine | 0.189 | 0.466 | 0.406 | 0.685 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | bilirubin | 0.052 | 0.464 | 0.112 | 0.911 |
| 22 | dipeptides, cortisol, vitamin metabolites | 0.216551 | 20 | deoxyuridine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | possible peptide | 0.507 | 0.166 | 3.054 | 0.002 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LysoPE 18:2 | 0.614 | 0.171 | 3.591 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 41:7/PE 44:7 | 0.317 | 0.159 | 1.991 | 0.047 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | possible peptide | 0.773 | 0.179 | 4.323 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 11:1 | 0.379 | 0.161 | 2.355 | 0.019 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 13:1 | 0.369 | 0.161 | 2.292 | 0.022 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 40:7 | 0.381 | 0.159 | 2.394 | 0.017 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 33:3/PE 36:3 | 0.54 | 0.167 | 3.229 | 0.001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | bis(2-ethylhexyl)phthalate | 0.298 | 0.159 | 1.877 | 0.061 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 42:6 | 0.529 | 0.167 | 3.169 | 0.002 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | tricarballylic acid | 2.205 | 0.303 | 7.272 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | ascorbate | 2.207 | 0.303 | 7.273 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | hypoxanthine | 2.047 | 0.287 | 7.125 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (phenylalanine phenylalanine) | 0.982 | 0.193 | 5.08 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 15R-PGE2 methyl ester, 15-acetate | 0.466 | 0.164 | 2.839 | 0.005 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 3-dehydroxycarnitine | 0.459 | 0.163 | 2.819 | 0.005 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 33:3/PE 36:3 | 0.674 | 0.174 | 3.873 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | cortisol | 0.335 | 0.16 | 2.101 | 0.036 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-methyltetrahydrofolate | 0.55 | 0.168 | 3.275 | 0.001 |
| 23 | PC/PE | 0.534148 | 16 | PC 39:8/PE 42:8 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 37:4/PE 40:4 | 0.982 | 0.055 | 17.827 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 35:5/PE 38:5 | 0.788 | 0.066 | 12.027 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 40:4 | 0.758 | 0.067 | 11.331 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 33:4/PE 36:4 | 0.691 | 0.069 | 9.984 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 43:8/PE 46:8 | 0.799 | 0.065 | 12.279 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 42:3 | 0.857 | 0.062 | 13.759 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 44:3 | 0.715 | 0.069 | 10.42 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 35:5/PE 38:5 | 0.776 | 0.066 | 11.746 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 38:4 | 0.641 | 0.071 | 8.991 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:5/PE 37:5 | 0.858 | 0.062 | 13.776 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:7/PE 37:7 | 0.758 | 0.067 | 11.344 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 35:3/PE 38:3 | 0.76 | 0.067 | 11.371 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 37:7/PE 40:7 | 0.81 | 0.065 | 12.541 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 37:5/PE 40:5 | 0.86 | 0.062 | 13.84 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 35:4/PE 38:4 | 0.871 | 0.062 | 14.15 | <0.0001 |
| 24 | PC/PE, PS | 0.318701 | 11 | PC 41:8/PE 44:8 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 42:3 | 1.06 | 0.125 | 8.505 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 43:7/PE 46:7 | 1.157 | 0.127 | 9.088 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 40:8/PE 43:8 | 0.91 | 0.122 | 7.473 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 38:6/PE 41:6 | 1.007 | 0.124 | 8.149 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 18:0 | 0.709 | 0.118 | 5.987 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | possible peptide | 0.817 | 0.119 | 6.838 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | tripeptide (cysteine histidine lysine) | 0.539 | 0.116 | 4.643 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 40:3 | 0.441 | 0.116 | 3.809 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dethiobiotin | 0.493 | 0.116 | 4.242 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 38:7 | 0.554 | 0.117 | 4.742 | <0.0001 |
| 25 | MC-AC | 0.560472 | 20 | AC 4:0 (OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 6:0 (OH) | 1.177 | 0.145 | 8.116 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | O-adipoylcarnitine | 0.822 | 0.132 | 6.213 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetyl-DL-methionine | 0.504 | 0.126 | 4.011 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | pterin | 0.632 | 0.129 | 4.918 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 8:0 (OH) | 1.553 | 0.161 | 9.648 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 10:0 (OH) | 1.579 | 0.162 | 9.738 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 12:0 | 1.577 | 0.162 | 9.735 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 8:0 | 1.551 | 0.161 | 9.643 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 10:0 | 1.559 | 0.161 | 9.666 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 10:1 | 1.528 | 0.16 | 9.58 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 14:1 | 1.518 | 0.159 | 9.536 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 14:2 | 1.423 | 0.155 | 9.164 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 12:1 | 1.503 | 0.159 | 9.476 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 2:0 | 1.264 | 0.148 | 8.515 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 6:0 | 1.543 | 0.161 | 9.614 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 8:1 | 0.823 | 0.133 | 6.207 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 10:3 | 0.798 | 0.132 | 6.045 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 10:2 | 1.37 | 0.153 | 8.953 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 12:2 | 1.169 | 0.145 | 8.067 | <0.0001 |
| 26 | MC/LC-FA (DiC), FA (OH) | 0.6875 | 10 | FA 10:0 (OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 7-oxo-11E-tetradecenoic acid | 0.986 | 0.028 | 35.244 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 12:0 (OH) | 0.993 | 0.026 | 37.619 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Keto 14:0 | 0.997 | 0.026 | 38.575 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 7-oxo-11-hexadecenoic acid | 0.961 | 0.032 | 30.292 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 12:2 | 0.825 | 0.046 | 17.788 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:0 (DiC) | 0.654 | 0.058 | 11.354 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:0 (DiC) | 0.626 | 0.059 | 10.602 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 12:0 (DiC) | 0.54 | 0.063 | 8.573 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:0 (OH) | 0.642 | 0.058 | 11.05 | <0.0001 |
| 27 | LC AC, SM | 0.57758 | 9 | SM d40:1 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d42:1 | 0.961 | 0.157 | 6.14 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 35:3/PE 38:3 | 0.911 | 0.154 | 5.904 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PS 46:6 | 1.023 | 0.159 | 6.416 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 14:0 | 1.625 | 0.193 | 8.419 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 18:1 | 1.753 | 0.201 | 8.714 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 16:0 | 1.744 | 0.201 | 8.687 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 18:2 | 1.557 | 0.189 | 8.25 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 42:7/PE 45:7 | 1.331 | 0.175 | 7.588 | <0.0001 |
| 28 | PI, SM, PC/PE | 0.569867 | 14 | PI 41:1 | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 42:1 | 0.996 | 0.125 | 7.959 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 43:1 | 1.123 | 0.128 | 8.774 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d41:2 | 1.108 | 0.128 | 8.681 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d42:2 | 1.044 | 0.126 | 8.27 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d34:1 | 1.389 | 0.135 | 10.29 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d34:2 | 1.472 | 0.137 | 10.713 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d36:2 | 1.342 | 0.134 | 10.038 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | cholesterol | 1.384 | 0.135 | 10.262 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d32:1 | 1.022 | 0.125 | 8.147 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | SM d33:1 | 1.199 | 0.13 | 9.255 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 34:0 | 1.141 | 0.128 | 8.879 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 39:5/PE 42:5 | 1.039 | 0.126 | 8.244 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 32:0/PE 35:0 | 1.077 | 0.127 | 8.484 | <0.0001 |
| 29 | Krebs Cycle intermediates | 0.348005 | 9 | FA 18:1 (DiC) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:2 (DiC) | 0.627 | 0.18 | 3.488 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | trans-aconitate | 1.772 | 0.275 | 6.45 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | citrate | 1.889 | 0.289 | 6.544 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | isocitrate | 1.404 | 0.238 | 5.886 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | glucaric acid | 1.074 | 0.21 | 5.11 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | glucuronic acid | 0.865 | 0.194 | 4.452 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | salicyluric acid | 0.711 | 0.185 | 3.85 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 19:3 | 0.791 | 0.189 | 4.179 | <0.0001 |
| 30 | choline, betaine | 0.284711 | 6 | betaine | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-aminopentanoate | 1.007 | 0.005 | 195.457 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | choline | 0.548 | 0.059 | 9.331 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | fluvoxamino acid | -0.02 | 0.067 | -0.295 | 0.768 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | pyridoxamine | -0.072 | 0.069 | -1.038 | 0.299 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetyl-L-alanine | -0.089 | 0.07 | -1.28 | 0.201 |
| 31 | lactose, MC-FA (keto), amino acids metabolites | 0.231824 | 10 | FA 22:2 (DiC) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 16-bromo-9E-hexadecenoic acid | 0.79 | 0.208 | 3.805 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | AC 11:3 | 0.224 | 0.177 | 1.271 | 0.204 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | monoethylhexyl phthalic acid | 0.774 | 0.207 | 3.75 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | LL-2,6-diaminoheptanedioate | 0.899 | 0.217 | 4.141 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-(tert-Butoxycarbonyl)-L-methionine | 0.954 | 0.222 | 4.294 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | possible peptide | 0.763 | 0.206 | 3.709 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | lactose | 0.723 | 0.202 | 3.583 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N-acetylneuraminate | 1.227 | 0.253 | 4.854 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | 5-oxo-7-octenoic acid | 0.669 | 0.198 | 3.373 | 0.001 |
| 32 | PA, di-/tri-peptides | 0.514309 | 17 | Tripeptide (glycine proline valine) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | tripeptide (tryptophan tyrosine isoleucine/leucine) | 1.388 | 0.304 | 4.562 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | inosine | 1.21 | 0.282 | 4.291 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | guanosine | 1.19 | 0.28 | 4.258 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (isoleucine/leucine alanine) | 0.984 | 0.255 | 3.851 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | N6,N6,N6-trimethyl-L-lysine | 0.44 | 0.209 | 2.106 | 0.035 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 17:3 | 2.227 | 0.422 | 5.276 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:4 | 1.76 | 0.354 | 4.966 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 19.3 | 2.661 | 0.488 | 5.454 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 21:3 | 2.52 | 0.466 | 5.404 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 23:3 | 2.718 | 0.497 | 5.472 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 22:3 | 2.295 | 0.432 | 5.309 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 24:3 | 2.719 | 0.497 | 5.472 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PA 25:3 | 2.601 | 0.479 | 5.433 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 15:0 (Dic, OH) | 2.589 | 0.477 | 5.429 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | dipeptide (methionine isoleucine/leucine) | 2.35 | 0.441 | 5.334 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | riboflavin | 2.386 | 0.446 | 5.35 | <0.0001 |
| 33 | LC-FA (DiC, OH) | 0.903312 | 8 | FA 12:0 (DiC,OH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 16:0 (DiC,OH) | 1.004 | 0.028 | 35.363 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 18:3 (DiC, diOH) | 1.003 | 0.028 | 35.177 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 13:0 (DiC,OH) | 1.029 | 0.024 | 42.986 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:3 (DiC, diOH) | 0.992 | 0.03 | 32.936 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:1 (DiC, OH) | 0.985 | 0.031 | 31.609 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | testosterone | 1.025 | 0.025 | 41.392 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | Methyl 8-2-2-formyl-vinyl-3-hydroxy-5-oxo-cyclopentyl]-octanoate | 0.855 | 0.045 | 18.965 | <0.0001 |
| 34 | MC-FA (DiC), PI | 0.692663 | 13 | FA 17:3 (DiC, diOH) | reference | NaN | NaN | NaN |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 36:1 | 0.988 | 0.064 | 15.386 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 34:1 | 1.072 | 0.06 | 17.894 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 35:1 | 1.036 | 0.062 | 16.744 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PC 40:7/PE 43:7 | 0.955 | 0.066 | 14.497 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 37:1 | 1.11 | 0.058 | 19.243 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | PI 38:1 | 1.119 | 0.057 | 19.547 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 21:3 (DiC, diOH) | 0.944 | 0.066 | 14.232 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 12:1 (DiC) | 0.954 | 0.065 | 14.6 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:1 (DiC) | 1.033 | 0.062 | 16.712 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 19:3 (DiC, diOH) | 1.07 | 0.06 | 17.861 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 10:1 (DiC) | 0.769 | 0.073 | 10.58 | <0.0001 |
| NaN | NaN | NaN | NaN | FA 14:0 (DiC,OH) | 0.773 | 0.073 | 10.631 | <0.0001 |