

Metabolite (name in models)	Concentration (mmol/L)	ID	iBif452	iFap484
D-Galactose_C6H12O6	0,05	m676	✓	✓
L-Lactate_C3H5O3	0,05	m25	✓	✓
Sodium_Na	26,4	m66	✓	✓
CO2_CO2	16	m22	✓	✓
potassium_K	1,8	m729	✓	✓
Calcium_Ca	0,68	m766	✓	✓
Cu2+_Cu	1,8	m743	✓	✓
Fe2+_Fe	1,8224	m704	✓	✓
Fe3+_Fe	0,0916117952	m612	✓	✓
Co2+_Co	0,0008	m746	✓	✓
Mn2+_	0,1	m735	✓	✓
H2O_H2O	1	m8	✓	✓
Acetate_C2H4O2	0,28	m19	✓	✓
Folate_C19H19N7O6	0,0002	m793		✓
Riboflavin_C17H20N4O6	0,0002	m606	✓	✓
Thiamin_C12H17N4OS	0,0002	m597	✓	✓
Nicotinate_C6H5NO2	0,0004	m369	✓	✓
L-Cysteine_C3H7NO2S	4	m250	✓	✓
L-Alanine_C3H7NO2	0,95	m154	✓	✓
L-Methionine_C5H11NO2S	0,5	m43	✓	✓
L-Serine_C3H7NO3	1,35	m74	✓	✓
L-Tryptophan_C11H12N2O2	0,3	m178	✓	✓
L-Threonine_C4H9NO3	0,3	m63	✓	✓
L-Asparagine_C4H8N2O3	0,3	m81	✓	✓
L-Tyrosine_C9H11NO3	0,3	m239	✓	✓
L-Glutamine_C5H10N2O3	0,4	m159	✓	✓
L-Valine_C5H11NO2	4	m46	✓	✓
L-Leucine_C6H13NO2	4	m52	✓	✓
psicoselysine_C12H25N2O7	4	m669	✓	✓
Zinc_Zn	0,4	m754		✓
Phosphate_H3O4P	4	m9	✓	✓
Ammonium_H3N	4	m10	✓	✓
Spermidine_C7H19N3	4	m181		✓
Xanthine_C5H4N4O2	4	m265	✓	✓
N-Acetyl-D-glucosamine_C8H15NO6	4	m324	✓	✓
Dodecanoate (n-C12:0)_C12H24O2	4	m431	✓	✓
tetradecanoate (n-C14:0)_C14H28O2	4	m434	✓	✓
octadecanoate (n-C18:0)_C18H36O2	4	m442	✓	✓