**Supporting Information for**

Atom Identifiers Generated by a Neighborhood-Specific Graph Coloring Method Enable Compound Harmonization Across Metabolic Databases

Huan Jin 1, Joshua M. Mitchell 2,3,4 and Hunter N.B. Moseley 2, 3, 4, 5, \*

1 Department of Toxicology and Cancer Biology, University of Kentucky, Lexington, KY 40536, USA; huan.jin@uky.edu

2 Department of Molecular & Cellular Biochemistry, University of Kentucky, Lexington, KY 40536, USA

3 Markey Cancer Center, University of Kentucky, Lexington, KY 40536, USA

4 Resource Center for Stable Isotope Resolved Metabolomics, University of Kentucky, Lexington, KY 40536, USA

5 Institute for Biomedical Informatics, University of Kentucky, Lexington, KY 40536, USA

**\*** Correspondence: hunter.moseley@uky.edu; Tel.: 859-218-2964

"(1)(C(C(C,1)(C,1))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)O(C,1)O(C,2))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,1)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)O(C,1)O(C,2))(C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)O(C,1)O(C,2))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)O(C,1)O(C,2)))(1)(C(C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)O(C,1)O(C,2)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(C(C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(O(O(C,1))(C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)O(C,1)O(C,2))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))(1)(O(O(C,2))(C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)O(C,1)O(C,2))(C(C,1)(C,4)(C,4)C(C,1)(O,1)(O,2)C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)C(C,4)(C,4)C(C,4)(C,4)(C,4)))"

A.

"(1)(C000(C000(C000,10)(C000,10))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O000(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O000(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O000(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)O000(C000,10)O000(C000,20)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O000(C000,10)O000(C000,20)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(O000(O000(C000,10))(C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O000(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(O000(O000(C000,20))(C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O000(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20)C000(C000,10)(O000,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))"

B.

"(1)(C000(C000(C000,10)(C000,10))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O0-10(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O0-10(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O0-10(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)O0-10(C000,10)O000(C000,20)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)O0-10(C000,10)O000(C000,20)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(C000(C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(O0-10(O0-10(C000,10))(C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O0-10(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))(1)(O000(O000(C000,20))(C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)O0-10(C000,10)O000(C000,20))(C000(C000,10)(C000,40)(C000,40)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20)C000(C000,10)(O0-10,10)(O000,20))(C000(C000,10)(C000,10)C000(C000,40)(C000,40)C000(C000,40)(C000,40)(C000,40)))"

C.

**S Figure 1.** Derived coloring identifier. A) Loose coloring identifier for MetaCyc CPD-20570 and KEGG C13014; B) Tight coloring identifier for KEGG C13014; C) Tight coloring identifier for MetaCyc CPD-20570.

**![A picture containing table

Description automatically generated](data:image/tiff;base64,TU0AKgAA6sD//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////v7+/9TU1P+trK3/2tra/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5eXl/8ODg7/AAAA/woKCv8AAAD/ERER/6CgoP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+BgYH/DAwM/2pqav/AwMD//f39/729vf9lZWX/CgoK/4aGhv//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////6Ojo/w0NDf93d3f///////////////////////////9paWn/DQ0N/+/v7/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+np6f/AAAA/9fX1////////////////////////////8DAwP8AAAD/v7+//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////4SEhP8EBAT/+vr6////////////////////////////4+Pj/wAAAP+jo6P/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////lJSU/wAAAP/y8vL////////////////////////////Jycn/AAAA/76+vv////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+7u7v/AAAA/76+vv///////////////////////////46Ojv8BAQH/6Ojo//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////j4+P8YGBj/S0tL///////////////////////9/f3/KCgo/z8/P////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////46Ojv8AAAD/XV1d/9vb2///////1dXV/0ZGRv8NDQ3/xsbG/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5ycnP8QEBD/AAAA/wkJCf8AAAD/JCQk/8/Pz/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v/W1tb/tbW1/+jo6P////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8AAAD/////////////////AAAA/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////wAAAP////////////////8AAAD/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////AAAA/////////////////wAAAP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8AAAD/////////////////AAAA/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////wAAAP////////////////8AAAD/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////AAAA/////////////////wAAAP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8AAAD/////////////////AAAA/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////wAAAP////////////////8AAAD/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////AAAA/////////////////wAAAP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8AAAD/////////////////AAAA/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////wAAAP////////////////8AAAD/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////AAAA/////////////////wAAAP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8AAAD//////+bm5v//////AAAA/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////wAAAP+Hh4f/BQUF/4eHh/8AAAD////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////y8vL/TExM/x8fH/+jo6P/Hx8f/0xMTP/y8vL////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////n5+f//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+bm5v//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5+fn/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+fn5///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////y8vL/x8fH/9NTU3/8vLy///////y8vL/TU1N/x8fH//Ly8v////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////19fX/aWlp/wQEBP9kZGT/7+/v//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////X19f9paWn/BAQE/2lpaf/19fX/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v/2NjY/8EBAT/aWlp//X19f////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////X19f9paWn/BAQE/2RkZP/v7+///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////46Ojv8RERH/j4+P////////////////////////////j4+P/xEREf+Ojo7/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////n56f/xkZGf9DQ0P/vLy8/0xMTP8TExP/hoaG//z8/P////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+fnp//GRkZ/0NDQ/+7u7v/Q0ND/xkZGf+goKD//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Pz8/4WFhf8TExP/TExM/729vf9DQ0P/GRkZ/6CgoP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+fnp//GRkZ/0NDQ/+8vLz/TExM/xMTE/+Ghob//Pz8//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Ly8v9MTEz/Hx8f/8vLy///////////////////////////////////////y8vL/x8fH/9MTEz/8vLy////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////zMzM/zU1Nf8hISH/sbGx/////////////////8XExf80NDT/Hx8f/6Wlpf/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////MzMz/NTU1/yEhIf+xsbH/////////////////sbGx/yEhIf81NTX/zc3N/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////6Wlpf8fHx//NDQ0/8XExf////////////////+xsbH/ISEh/zU1Nf/Nzc3////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////MzMz/NTU1/yEhIf+xsbH/////////////////xcTF/zQ0NP8fHx//paWl///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Ly8v/Hx8f/01NTf/y8vL/////////////////////////////////////////////////8vLy/01NTf8fHx//y8vL////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7u7u/19fX/8RERH/f39///r6+v////////////////////////////////+lpaX/Hx8f/zMzM//Dw8P////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////u7u7/X19f/xEREf9/f3//+vr6////////////////////////////+vr6/39/f/8RERH/X19f/+7u7v///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8PDw/8zMzP/Hx8f/6ampv/////////////////////////////////6+vr/f39//xEREf9fX1//7u7u///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////u7u7/X19f/xEREf9/f3//+vr6/////////////////////////////////6Wlpf8fHx//MzMz/8PDw///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////jo6O/xEREf+Pj4///////////////////////////////////////////////////////////////////////4+Pj/8RERH/jo6O////////////8vLy//b29v///////////////////////f39//Ly8v///////////////////////v7+/46Ojv8TExP/UVFR/+Xl5f/////////////////////////////////////////////////8/Pz/hoaG/xMTE/9MTEz/3Nzc///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7/jo6O/xMTE/9RUVH/5eXl/////////////////////////////////////////////////+Xl5f9RUVH/ExMT/4+Pj//+/v7//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9zc3P9LS0v/ExMT/4aGhv/8/Pz/////////////////////////////////////////////////5eXl/1FRUf8TExP/j4+P//7+/v/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7/jo6O/xMTE/9RUVH/5eXl//////////////////////////////////////////////////z8/P+Ghob/ExMT/0xMTP/c3Nz//////////////////////////////////f39/8zMzP+rq6v/1NTU///////////////////////09PT/+Pj4///////////////////////8/Pz/8vLy////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8vLy/0xMTP8fHx//y8vL/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8vLy/8fHx////////////8ODg7/Dw8P/+Xl5f////////////////+xsbH/AAAA//T09P///////////7+/v/8pKSn/Kioq/7+/v///////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v/2hoaP8QEBD/aGho/+/v7///////////////////////////////////////////////////////////////////////v7+//ykpKf8qKir/v7+///////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7//Kioq/yoqKv+/v7///////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7/9oaGj/EBAQ/2lpaf/w8PD//////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v/8qKir/Kioq/7+/v///////////////////////////////////////////////////////////////////////v7+//ykpKf8qKir/v7+////////////////////////////////////////////////////////////////////////v7+//aGho/xAQEP9oaGj/7+/v/////////////////52dnf8ODg7/AAAA/w0NDf8AAAD/Li4u/9LS0v///////////xMTE/9zc3P//////////////////////6Ojo/8AAAD/6Ojo/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8vLy/8fHx//TU1N//Ly8v////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Ly8v///////////w4ODv8LCwv/SkpK/////////////////7Gxsf8AAAD/9PT0//////9QUFD/FBQU/4+Pj//+/v7//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9zc3P9MTEz/ExMT/4aGhv/8/Pz/////////////////////////////////////////////////5eXl/1BQUP8UFBT/j4+P//7+/v/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7/j4+P/xQUFP9QUFD/5eXl//////////////////////////////////////////////////z8/P+FhYX/ExMT/0xMTP/d3d3///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v+Pj4//FBQU/1BQUP/l5eX/////////////////////////////////////////////////5eXl/1BQUP8UFBT/j4+P//7+/v//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////3Nzc/0xMTP8TExP///////////+NjY3/Dg4O/3d3d//V1dX//////8nJyf86Ojr/FRUV/+np6f//////ExMT/3Nzc///////////////////////o6Oj/wAAAP/o6Oj///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+Ojo7/ERER/4+Pj///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Dg4O/21tbf8KCgr/rayt////////////sbGx/wAAAP/09PT//////2BgYP/u7u7////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////FxMX/NDQ0/x8fH/+lpaX/////////////////////////////////+vr6/35+fv8RERH/YGBg/+7u7v//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7u7u/2BgYP8RERH/f39///r6+v////////////////////////////////+lpaX/Hx8f/zQ0NP/FxMX////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////u7u7/YGBg/xEREf9/f3//+vr6////////////////////////////+vr6/35+fv8RERH/YGBg/+7u7v///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8XExf//////7e3t/w0NDf96enr//////////////////////+vr6/9jY2P/yMjI//////8TExP/c3Nz//////////////////////+jo6P/AAAA/+jo6P/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////y8vL/TExM/x8fH//Ly8v///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8ODg7/kZGR/3Fxcf8bGxv/9fX1//////+xsbH/AAAA//T09P//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////paWl/x8fH/8zMzP/w8PD/////////////////6+vr/8gICD/NjY2/83Nzf///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////83Nzf82Njb/ICAg/6+vr//////////////////Dw8P/MzMz/x8fH/+mpqb/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////zc3N/zY2Nv8gICD/r6+v/////////////////6+vr/8gICD/NjY2/83Nzf////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+4uLj/AAAA/83Nzf///////////////////////////////////////////xMTE/9TU1P/tra2/7a2tv+2trb/tra2/3V1df8AAAD/6Ojo////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////xcTF/x8fH/9NTU3/8vLy/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////w4ODv+RkZH/9/f3/x4eHv9nZ2f//////7Gxsf8AAAD/9PT0/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Pz8/4aGhv8TExP/TExM/7y8vP9CQkL/GRkZ/6CgoP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+goKD/GRkZ/0JCQv+8vLz/S0tL/xMTE/+Ghob//Pz8/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////6CgoP8ZGRn/QkJC/7u7u/9CQkL/GRkZ/6CgoP///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5aWlv8AAAD/8fHx////////////////////////////////////////////ExMT/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP/o6Oj//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+np6f8EBAT/hoaG////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Dg4O/5GRkf//////sbGx/wcHB//Kysr/sbGx/wAAAP/09PT//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+/v7/9jY2P/BAQE/2pqav/19fX////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////19fX/ampq/wQEBP9lZWX/8PDw//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////X19f9qamr/BAQE/2pqav/19fX/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////srKy/wAAAP/l5eX///////////////////////////////////////////8TExP/bW1t//Dw8P/w8PD/8PDw//Dw8P+ZmZn/AAAA/+jo6P///////////4+Pj/81NTX/S0tL/6ampv///////////////////////////////////////////////////////////zc3N/+YmJj///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8ODg7/kZGR////////////SkpK/y0tLf+vr6//AAAA//T09P/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////o6Oj/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////6Ojo///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////o6Oj////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////c3Nz/AAAA/7a2tv//////////////////////+Pj4/yMjI/+SkpL//////xMTE/9zc3P//////////////////////6Ojo/8AAAD/6Ojo//////+4uLj/Ghoa/6Ghof+ysrL/ERER/+np6f//////////////////////////////////////////////////////iYmJ/0ZGRv/////////////////19fX//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////w4ODv+RkZH////////////k5OT/DQ0N/0VFRf8AAAD/9PT0//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v8cHBz/SUlJ//////////////////////+hoaH/AAAA/8rKyv//////ExMT/3Nzc///////////////////////o6Oj/wAAAP/o6Oj//////5WVlf+NjY3///////////8kIyT/tbW1///////////////////////////////////////////////////////k5OT/DQ0N//f39///////9fX1/xMTE//r6+v/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Dg4O/5GRkf////////////////+FhYX/AAAA/wAAAP/09PT//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7Gxsf8BAQH/ZWVl/+Hh4f/4+Pj/q6ur/xAQEP9LS0v///////////8TExP/c3Nz//////////////////////+jo6P/AAAA/+jo6P////////////////+oqKj/Tk5O/ysrK//6+vr///////////////////////////////////////////////////////////8uLi7/p6en////////////QkJC/4iIiP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8ODg7/kZGR//////////////////39/f8oKCj/AAAA//T09P///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////46Ojv8QEBD/AAAA/wUFBf8FBQX/X19f//b29v///////////xMTE/9zc3P//////////////////////6Ojo/8AAAD/6Ojo/////////////////6+vr/9aWlr/GBgY/76+vv///////////////////////////////////////////////////////////3p6ev9SUlL///////////+ioqL/Li4u//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////r6+v/Nzc3/xcTF//b29v///////////////////////////////////////////////////////////////////////////6+vr//Z2Nn///////////9dXV3/YGBg////////////////////////////////////////////////////////////1tbW/xMTE//9/f3///////j4+P8RERH/19fX////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////e3t7/1tbW//+/v7//////z4+Pv+dnZ3/////////////////////////////////////////////////////////////////JCMk/7e3t////////////1lZWf9wcHD/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////tra2/yQkJP/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////h4eH/PDw8/x8fH/8iIiL/SEhI//r6+v////////////////////////////////////////////////////////////////9tbW3/YGBg////////////vb29/xwcHP////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9fX1//bW1t////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5eXl//T09P///////////////////////////////////////////////////////////////////////////8fHx/8aGhr/////////////////HBwc/729vf///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////xoaGv/Hx8f//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////xoaGv/Hx8f///////////9wcHD/WVlZ///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Hx8f/Ghoa////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////X19f/21tbf///////////9fX1/8RERH/+Pj4/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////21tbf9gYGD///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+2trb/JCMk/////////////////y4uLv+jo6P///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////39/f8TExP/1tbW////////////iIiI/0NDQ//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////V1dX/s7Oz/+7u7v///////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////1JSUv97e3v////////////r6+v/ExMT//b29v/////////////////////////////////////////////////////////////////g4OD/MjIy/wAAAP8ODg7/CgoK/y8vL/+lpaX/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////p6en/y4uLv/////////////////29vb//////////////////////////////////////////////////////////////////////zU1Nf82Njb/0NHQ///////6+vr/cXFx/wcHB//W1tb////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////39/f/DQ0N/+Tk5P//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Dg4O/2dnZ//////////////////9/f3/eHh4/8/Pz/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9FRUX/iYmJ//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////8/Pz//CgoK/2lpaf+8vLz//Pz8/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////5eXl/86Ojr//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////+jo6P9aWlr/EBAQ/wAAAP8MDAz/R0dH/76+vv//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////7+/v/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP8AAAD/AAAA/wAAAP8AAAD/AAAA///////////////////////39/f/tbW1/2VlZf8TExP/BgYG/7y8vP//////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9vb2/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////9vb2/+Li4v//v7+//////////////////Ly8v8NDQ3/Wlpa////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////x8fH/wAAAP/Dw8P//////////////////////zQ0NP9UVFT////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////6+vr/IiIi/y4uLv/d3d3///////39/f+cnJz/CQkJ/5iYmP/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////Nzc3/Kioq/wAAAP8TExP/CgoK/yIiIv95eXn/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////1tbW/7Ozs//l5eX/////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////////ABABAAADAAAAAQDLAAABAQADAAAAAQBKAAABAgADAAAABAAA64YBAwADAAAAAQABAAABBgADAAAAAQACAAABCgADAAAAAQABAAABEQAEAAAAAQAAAAgBEgADAAAAAQABAAABFQADAAAAAQAEAAABFgADAAAAAQBKAAABFwAEAAAAAQAA6rgBHAADAAAAAQABAAABKAADAAAAAQACAAABUgADAAAAAQABAAABUwADAAAABAAA646HcwAHAAAH2AAA65YAAAAAAAgACAAIAAgAAQABAAEAAQAAB9hhcHBsAiAAAG1udHJSR0IgWFlaIAfZAAIAGQALABoAC2Fjc3BBUFBMAAAAAGFwcGwAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAD21gABAAAAANMtYXBwbAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAC2Rlc2MAAAEIAAAAb2RzY20AAAF4AAAFnGNwcnQAAAcUAAAAOHd0cHQAAAdMAAAAFHJYWVoAAAdgAAAAFGdYWVoAAAd0AAAAFGJYWVoAAAeIAAAAFHJUUkMAAAecAAAADmNoYWQAAAesAAAALGJUUkMAAAecAAAADmdUUkMAAAecAAAADmRlc2MAAAAAAAAAFEdlbmVyaWMgUkdCIFByb2ZpbGUAAAAAAAAAAAAAABRHZW5lcmljIFJHQiBQcm9maWxlAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAABtbHVjAAAAAAAAAB8AAAAMc2tTSwAAACgAAAGEZGFESwAAAC4AAAGsY2FFUwAAACQAAAHadmlWTgAAACQAAAH+cHRCUgAAACYAAAIidWtVQQAAACoAAAJIZnJGVQAAACgAAAJyaHVIVQAAACgAAAKaemhUVwAAABYAAALCbmJOTwAAACYAAALYY3NDWgAAACIAAAL+aGVJTAAAAB4AAAMgaXRJVAAAACgAAAM+cm9STwAAACQAAANmZGVERQAAACwAAAOKa29LUgAAABYAAAO2c3ZTRQAAACYAAALYemhDTgAAABYAAAPMamFKUAAAABoAAAPiZWxHUgAAACIAAAP8cHRQTwAAACYAAAQebmxOTAAAACgAAAREZXNFUwAAACYAAAQedGhUSAAAACQAAARsdHJUUgAAACIAAASQZmlGSQAAACgAAASyaHJIUgAAACgAAATacGxQTAAAACwAAAUCcnVSVQAAACIAAAUuYXJFRwAAACYAAAVQZW5VUwAAACYAAAV2AFYBYQBlAG8AYgBlAGMAbgD9ACAAUgBHAEIAIABwAHIAbwBmAGkAbABHAGUAbgBlAHIAZQBsACAAUgBHAEIALQBiAGUAcwBrAHIAaQB2AGUAbABzAGUAUABlAHIAZgBpAGwAIABSAEcAQgAgAGcAZQBuAOgAcgBpAGMAQx6lAHUAIABoAOwAbgBoACAAUgBHAEIAIABDAGgAdQBuAGcAUABlAHIAZgBpAGwAIABSAEcAQgAgAEcAZQBuAOkAcgBpAGMAbwQXBDAEMwQwBDsETAQ9BDgEOQAgBD8EQAQ+BEQEMAQ5BDsAIABSAEcAQgBQAHIAbwBmAGkAbAAgAGcA6QBuAOkAcgBpAHEAdQBlACAAUgBWAEIAwQBsAHQAYQBsAOEAbgBvAHMAIABSAEcAQgAgAHAAcgBvAGYAaQBskBp1KAAgAFIARwBCACCCcl9pY8+P8ABHAGUAbgBlAHIAaQBzAGsAIABSAEcAQgAtAHAAcgBvAGYAaQBsAE8AYgBlAGMAbgD9ACAAUgBHAEIAIABwAHIAbwBmAGkAbAXkBegF1QXkBdkF3AAgAFIARwBCACAF2wXcBdwF2QBQAHIAbwBmAGkAbABvACAAUgBHAEIAIABnAGUAbgBlAHIAaQBjAG8AUAByAG8AZgBpAGwAIABSAEcAQgAgAGcAZQBuAGUAcgBpAGMAQQBsAGwAZwBlAG0AZQBpAG4AZQBzACAAUgBHAEIALQBQAHIAbwBmAGkAbMd8vBgAIABSAEcAQgAg1QS4XNMMx3xmbpAaACAAUgBHAEIAIGPPj/Blh072TgCCLAAgAFIARwBCACAw1zDtMNUwoTCkMOsDkwO1A70DuQO6A8wAIAPAA8EDvwPGA68DuwAgAFIARwBCAFAAZQByAGYAaQBsACAAUgBHAEIAIABnAGUAbgDpAHIAaQBjAG8AQQBsAGcAZQBtAGUAZQBuACAAUgBHAEIALQBwAHIAbwBmAGkAZQBsDkIOGw4jDkQOHw4lDkwAIABSAEcAQgAgDhcOMQ5IDicORA4bAEcAZQBuAGUAbAAgAFIARwBCACAAUAByAG8AZgBpAGwAaQBZAGwAZQBpAG4AZQBuACAAUgBHAEIALQBwAHIAbwBmAGkAaQBsAGkARwBlAG4AZQByAGkBDQBrAGkAIABSAEcAQgAgAHAAcgBvAGYAaQBsAFUAbgBpAHcAZQByAHMAYQBsAG4AeQAgAHAAcgBvAGYAaQBsACAAUgBHAEIEHgQxBEkEOAQ5ACAEPwRABD4ERAQ4BDsETAAgAFIARwBCBkUGRAZBACAGKgY5BjEGSgZBACAAUgBHAEIAIAYnBkQGOQYnBkUARwBlAG4AZQByAGkAYwAgAFIARwBCACAAUAByAG8AZgBpAGwAZXRleHQAAAAAQ29weXJpZ2h0IDIwMDcgQXBwbGUgSW5jLiwgYWxsIHJpZ2h0cyByZXNlcnZlZC4AWFlaIAAAAAAAAPNSAAEAAAABFs9YWVogAAAAAAAAdE0AAD3uAAAD0FhZWiAAAAAAAABadQAArHMAABc0WFlaIAAAAAAAACgaAAAVnwAAuDZjdXJ2AAAAAAAAAAEBzQAAc2YzMgAAAAAAAQxCAAAF3v//8yYAAAeSAAD9kf//+6L///2jAAAD3AAAwGw=)**

KEGG: C18752

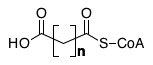
**S Figure 2.** KEGG compound with S-containing aromatic ring.

**S Table 1.** Compounds with the same coloring identifiers, which includes R groups.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Databases** | **Tight coloring identifier** | **Loose coloring identifier** |
| KEGG | 209 (1.1%) | 1132 (6.1%) |
| MetaCyc | 449 (2.4%) | 1638 (8.1%) |

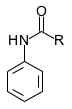
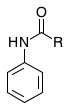
KEGG: C02389

KEGG: C00530



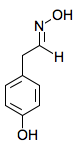
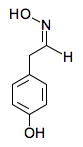
KEGG: C00083

KEGG: C03188



KEGG: C00484

KEGG: C01402



KEGG: C04353

KEGG: C04350



KEGG: C01756

KEGG: C02380

**A**

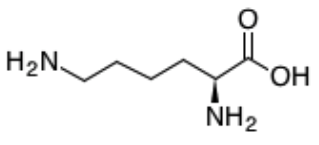
**B**

**D**

**C**

**E**

**S Figure 3.** Representative compounds that cannot be distinguished by coloring identifier. A) Compound and its radical form; B) Compound containing repeated substructure; C) Compound with R representing a generic group; D) Isomers containing C=N; E) Compounds after curation of aromatic substructures.



9

4

10

7

6

3

1

2

5

8

**S Figure 4.** KEGG Compound C00047.

**S Table 2.** Generation of atom identifiers for compound C00047 via graph coloring method.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Round** | **Atom identifier** | **Atom index** |
| 1 | C | 1, 2, 3, 5, 8, 9 |
| N | 4, 10 |
| O | 6, 7 |
| 2 | C(C(C,1)(C,1)(N,1)) | 1 |
| C(C(C,1)(C,1)) | 2, 5, 8 |
| C(C(C,1)(O,1)(O,2)) | 3 |
| N(N(C,1)) | 4, 10 |
| O(O(C,1)) | 6 |
| O(O(C,2) | 7 |
| C(C(C,1)(N,1)) | 9 |
| 3 | C(C(C,1)(C,1)(N,1))(C(C,1)(C,1)C(C,1)(O,1)(O,2)N(C,1)) | 1 |
| C(C(C,1)(C,1))(C(C,1)(C,1)C(C,1)(C,1)(N,1)) | 2 |
| C(C(C,1)(O,1)(O,2))(C(C,1)(C,1)(N,1)O(C,1)O(C,2)) | 3 |
| N(N(C,1))(C(C,1)(C,1)(N,1)) | 4 |
| C(C(C,1)(C,1))(C(C,1)(C,1)C(C,1)(C,1)) | 5 |
| O(O(C,1))(C(C,1)(O,1)(O,2)) | 6 |
| O(O(C,2))(C(C,1)(O,1)(O,2)) | 7 |
| C(C(C,1)(C,1))(C(C,1)(C,1)C(C,1)(N,1)) | 8 |
| C(C(C,1)(N,1))(C(C,1)(C,1)N(C,1)) | 9 |
| N(N(C,1))(C(C,1)(N,1)) | 10 |
| Only chemical information of atom type and bond type is included in atom naming. The first three rounds of naming are shown above. | | |