

Table S2: Compartment-specific concentrations for the most highly connected metabolites in Recon 1 were assembled from HMDB (31) and literature (54, 55, 56, 57, 58, 59, 60). Metabolite names corresponding to the abbreviations in the table are given in the Supporting Data.

Metabolite	x_{min} (M)	x_{max} (M)
adp[c]	1.00×10^{-7}	1.90×10^{-3}
adp[m]	2.60×10^{-3}	9.40×10^{-3}
amp[c]	1.00×10^{-7}	1.20×10^{-3}
atp[c]	1.29×10^{-3}	4.90×10^{-3}
atp[m]	2.80×10^{-3}	2.04×10^{-2}
coa[c]	2.92×10^{-5}	1.17×10^{-4}
coa[m]	2.20×10^{-3}	3.90×10^{-3}
nal[c]	1.00×10^{-7}	2.50×10^{-2}
nal[e]	1.33×10^{-1}	1.55×10^{-1}
nad[c]	1.05×10^{-4}	7.57×10^{-4}
nad[m]	5.00×10^{-4}	7.50×10^{-3}
nadh[c]	9.26×10^{-7}	3.83×10^{-4}
nadh[m]	1.00×10^{-7}	1.10×10^{-3}
nadp[c]	1.00×10^{-7}	5.83×10^{-6}
nadp[m]	1.00×10^{-7}	1.50×10^{-3}
nadph[c]	1.00×10^{-7}	3.75×10^{-4}
nadph[m]	1.00×10^{-7}	4.20×10^{-3}
nh4[c]	7.00×10^{-4}	9.00×10^{-4}
pi[c]	1.00×10^{-3}	6.30×10^{-3}
ppi[c]	2.10×10^{-3}	7.60×10^{-3}
udp[g]	1.40×10^{-6}	1.40×10^{-4}
h2o	1.00×10^1	1.00×10^1
co2	1.00×10^{-4}	1.00×10^{-4}
co2[c]	1.00×10^{-7}	1.40×10^{-4}
o2	8.20×10^{-8}	8.20×10^{-6}
o2[c]	1.00×10^{-7}	8.20×10^{-6}
h	$1.00 \times 10^{-\text{pH}}$	$1.00 \times 10^{-\text{pH}}$