

Base de dades de metabolòmica

BBIOREFCODE 2-0-0

L'any 2007 el SeRMN va sol·licitar un ajut per la compra d'un base de dades de metabonòmica a la convocatòria de [l'Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca \(AGAUR\)](#) per a atorgar [ajuts per a equipament i infraestructura destinats a la recerca \(PEIR - DGR 2007\)](#). La petició es va resoldre favorablement amb la concessió de l'ajut PEIR07-B-00010-50. L'any 2008 es va executar la compra a l'empresa Bruker Española, S.A., compra que va incloure,

- la base de dades BBIOREFCODE 2-0-0
- una llicència flotant del programa [Amix](#), i
- una llicència del programa [PERCH Tools for BRUKER Software](#).

BBIOREFCODE 2-0-0

A principis de 2009 vàrem rebre un CD-R amb la base de dades BBIOREFCODE, composta per les dades espectroscòpiques de rmn 1D i 2D de 500 metabòlits. El CD-R contenia un únic fitxer, aparentment en format TAR, que després de nombrosos intents, només es va poder obrir amb el programa [WinZip](#), cosa que ens fa pensar que es tracta d'una versió no estàndard de fitxer TAR.

Per altra banda, el CD-R no venia amb cap manual d'instruccions per instal·lar-ho. Les instruccions per importar bases de dades es troben al manual de l'Amix, *Chapter 14, Spectra bases*.

CD-R disponibles

El fitxer té una mida aproximada de 554 MB i un cop descomprimit ocupa uns 880 MB, i conté  167.471 fitxers agrupats en 14.823 carpetes. Ateses les dificultats amb el format del fitxer, he gravat dos CD-R que contenen,

1. la base de dades descomprimida. Aquest format és poc eficient per copiar el contingut a un disc dur, però permet la consulta directe del contingut de la base de dades.
2. La base de dades comprimida en un fitxer ZIP suposadament estàndard. Aquest és el CD-R recomanat per instal·lar la base de dades en un ordinador, ja que només s'ha de copiar un fitxer ZIP del CD al disc dur, i s'ha de descomprimir tot seguit.

Organització de la base de dades

El contingut de la base de dades s'organitza en carpetes de la següent forma,

```
bbiorefcode-2-0-0
|-- docu
|-- info
|-- pat
`-- ref
```

```

|-- 1,2-propanediol
|-- 1,3-diaminopropane
|-- 1,3-dimethylurea
|-- 1,3-propanediol
|-- 1,6-anhydro-b-D-glucose
|-- 1,7-dimethyluricacid
|-- 1-butanol
:
:
|-- xanthine
|-- xanthopterin
|-- xanthosine
|-- xanthurenicacid
`-- xylitol

```

504 directories

on

- les carpetes **docu** i **info** no contenen cap fitxer,
- la carpeta **pat** conté els següents fitxers,
 1. 1D.med
 2. cosygs.med
 3. invchlr.med
 4. invch.med
 5. invchmod.txt
 6. jresa.med
 7. pattern1.med
 8. pattern_file.txt
 9. pattern_hasc.med
 10. tocsyph.med
- i la carpeta **ref** conté 500 carpetes, cadascuna de les quals conté les **dades espectroscòpiques** d'un dels 500 metabòlits que componen la base de dades.

Compostos a la base de dades

(Per ordre alfabètic)

1,2-propanediol	beta-leucine	methanol
1,3-diaminopropane	biotin	methionine
1,3-dimethylurea	butyricacid	methyl-3-hydroxybutyrate
1,3-propanediol	cadaverine	methylamine
1,6-anhydro-b-D-glucose	caffeine	methylguanidine
1,7-dimethyluricacid	caprylicacid	methylmalonicacid
1-butanol	carnitine	mucicacid
1-methyl-2-pyrrolidone	carnosine	myo-inositol
1-methylnicotinamide	catechol	N1-acetylspermine
1-methyluricacid	chloramphenicol	N2-acetyl-L-ornithine
1-phenylethylalcohol	chlormequat	N8-acetylspermidine

2,2-dimethylsuccinicacid	chlorogenicacid	N-acetyl-5-hydroxytryptamine
2,3-dihydroxybenzoicacid	cholicacid	N-acetylalanine
2-(4-hydroxyphenyl)propionicacid	choline	N-acetylarginine
2,5-dihydroxypyridine	cis-4-hydroxy-D-proline	N-acetylasparticacid
2,5-furandicarboxylicacid	cis-aconiticacid	N-acetylcysteine
2-amino-2-methylsuccinicacid	cis,cis-muconicacid	N-acetyl-D-glucosamine
2-amino-3-phosphonopropionicacid	citraconicacid	N-acetylglycine
2-amino-5-hydroxybenzoicacid	citramalicacid	N-acetyl-L-glutamicacid
2-aminoadipicacid	citricacid	N-acetyl-L-glutamine
2-aminobutyricacid	citrulline	N-acetyllysine
2-aminoimidazole	cotinine	N-acetylneuraminicacid
2-aminoisobutyricacid	creatine	N-acetylphenylalanine
2-aminophenol	creatinine	N-acetylputrescine
2-aminopropanol	crotonaldehyde	N-acetyltryptophan
2-butanone	crotonicacid	N-acetyltyrosine
2-chlorophenol	cyclohexanone	N-amidinotaurine
2-deoxyadenosine	cycloleucine	niacinamide
2-deoxycytidine-5-monophosphate	cysteicacid	nicotinamide-N-oxide
2-ethylacrylicacid	cysteine	nicotinamideribotide
2-furoicacid	cystine	nicotinicacid
2-hexanone	cytidine	nicotinuricacid
2-hydroxy-2-methylbutyricacid	cytosine	N-isovaleroylglycine
2-hydroxy-3-methylvalericacid	deoxycytidine	N-methylasparticacid
2-hydroxy-4-methylvalericacid	deoxyinosine	N-methyl-L-alanine
2-hydroxy-5-methoxybenzoicacid	deoxyuridine	N-methyl-L-proline
2-hydroxybutyricacid	desthiobiotin	N-methylnicotinamide
2-hydroxyglutaricacid	D-galactose	N-methyltryptamine
2-hydroxyisobutyricacid	D-gluconicacid	N-methyltyramine
2-hydroxyisovalericacid	D-glucosamine	N,N-dimethylglycine
2-hydroxyphenylaceticacid	D-glucose	norepinephrine
2-hydroxypyridine	D-glucuronicacid	norleucine
2-hydroxyvalericacid	diethanolamine	normetanephine
2-ketobutyricacid	diethylmalonicacid	norvaline
2-methylbutyricacid	diglycolicacid	octanoyl-L-carnitine
2-methylbutyrylglycine	dihydrouacil	o-hydroxyhippuricacid
2-methylglutaricacid	dimethylamine	O-methylserotonin
2-methylsuccinicacid	dimethylphthalate	ornithine
2-oxoglutaricacid	dimethylsulfide	oroticacid
2-oxohexanoicacid	dithiothreitol	oxypurinol
2-oxoisocaproicacid	D,L-2,6-diaminopimelicacid	pantothenicacid
2-pentanone	D-lactose	paracetamol
2-phenylacetamide	D,L-cystathionine	paracetamol-glucuronide
2-phenylbutyricacid	D-mannitol	paracetamol-sulfate
2-phenylpropionicacid	D-mannose	para-coumaricacid
3-(2,4-dihydroxyphenyl)propionicacid	dopamine	paraxanthine
3-(2-hydroxyphenyl)propionicacid	D-panthenol	patulin

3-(3,4-dihydroxyphenyl)propionicacid	D-raffinose	p-cresol
3,3-dimethylacrylicacid	D-saccharicacid	pentaglycine
3-(3-hydroxyphenyl)propionicacid	D-sorbitol	phenacetin
3,4-dihydroxybenzoicacid	D-xylose	phenol
3,4-dihydroxymandelicacid	ectoine	phenylaceticacid
3,4-dihydroxyphenylaceticacid	epicatechine	phenylacetylglucine
3,4-dihydroxyphenylalanine	ethanol	phenylalanine
3,7-dimethyluricacid	ethanolamine	phenylethylalcohol
3-amino-1,2,4-triazole	ethionine	phenylethylamine
3-aminoadipicacid	ethosuximide	phenylpropionylglycine
3-aminobutyricacid	ethyl-2-methylacetoacetate	phloreticacid
3-aminoisobutyricacid	ethylcrotonate	phloroglucinol
3-hydroxy-2-butanone	ethyleneglycol	phosphocreatine
3-hydroxy-3-methylglutaricacid	ethylmalonicacid	phosphoenolpyruvate
3-hydroxy-4-methoxymandelicacid	folicacid	phosphoethanolamine
3-hydroxyadipicacid	formicacid	phosphothreonine
3-hydroxyanthranilicacid	fructose	phthalicacid
3-hydroxybenzoicacid	fumaricacid	picolinicacid
3-hydroxybutyricacid	furoylglycine	pimelicacid
3-hydroxyglutaricacid	galactinol	piperazine
3-hydroxyglutaricacidethylester	galactitol	porphobilinogen
3-hydroxyisovalericacid	galactose-1-phosphate	proline
3-hydroxymandelicacid	gallicacid	propanol
3-hydroxyphenylaceticacid	gamma-butyrolactone	propionicacid
3-hydroxypropionicacid	gentisicacid	propionylcarnitine
3-hydroxysebacicacid	glucose-D-1-phosphate	propionylglycine
3-methoxytyramine	glutamicacid	pseudouridine
3-methoxytyrosine	glutamine	purine
3-methyl-2-oxovalericacid	glutaricacid	putrescine
3-methyladipicacid	glycericacid	pyridoxal-5-phosphate
3-methylasparticacid	glycerol	pyridoxamine
3-methylbutanol	glycerol-1-phosphate	pyridoxicacid
3-methylcatechol	glycerophosphocholine	pyridoxine
3-methylcrotonylglycine	glycine	pyrimidine
3-methylglutaconicacid	glycolicacid	pyrrolidine
3-methylglutaricacid	glycyl-L-leucine	pyruvicacid
3-methylhistamine	glyoxylicacid	quinicacid
3-methylhistidine	guaicol	quinoline-3-carboxylicacid
3-oxoadipicacid	guanidinoaceticacid	quinolinicacid
3-phenyllacticacid	guanidinopropionicacid	R-adrenaline
3-phenylpropionicacid	guanidinosuccinicacid	resorcine
3-phenylpropionylglycine	guanosine	ribitol
3-sulfinioalanine	guanosine-5-diphosphate	S-5-adenosyl-L-homocysteine
3-tyramine	guanosine-5-phosphate	salicylicacid
3-ureidopropionicacid	hexanoicacid	salidroside
4-aminobenzoicacid	hexanoylglycine	sarcosine

4-aminobutyricacid	hippuricacid	scyllo-inositol
4-aminohippuricacid	histamine	sebacicacid
4-aminophenol	histidine	sepiapterin
4-guanidinobutyricacid	homoarginine	serine
4-heptanone	homocysteine	serotonin
4-hydroxy-3-methoxyphenylglycol	homogentisicacid	shikimicacid
4-hydroxybenzoicacid	homoserine	spermidine
4-hydroxybutyricacid	homovanillicacid	S-sulphocysteine
4-hydroxyhippuricacid	hordenine	subericacid
4-hydroxymandelicacid	hydantoicacid	suberylglycine
4-hydroxymethylimidazole	hydroferulicacid	succinamide
4-hydroxyphenylaceticacid	hydroquinone	succinicacid
4-hydroxyphenylethanol	hydroxyacetone	succinimide
4-hydroxyphenyllacticacid	hyocholicacid	sucrose
4-phenylbutyricacid	hyodeoxycholicacid	tartaricacid
5,6-dihydrothymine	hypotaurine	taurine
5-aminopentanoicacid	hypoxanthine	taurocyamine
5-hydroxyanthranilicacid	ibuprofen	terephthalicacid
5-hydroxyindole-3-aceticacid	imidazole	theobromine
5-hydroxymethylfurfural	imidazoleaceticacid	thiodiaceticacid
5-hydroxymethyluracil	indole-3-aceticacid	thioglycolicacid
5-hydroxytryptophan	indole-3-ethanol	threitol
5-methoxytryptophol	indole-3-lacticacid	threonicacid
5-methylcytosine	indole-3-propionicacid	threonine
6-methyladenine	indoxylsulfate	thymidine
6-methylnicotinicacid	inosine	thymine
7-methylxanthine	isethionnicacid	thymol
acetaldehyde	isobarbituricacid	tiglicacid
acetamide	isobutyricacid	tiglylglycine
acetanilide	isobutyrylcarnitine	trans-2-hydroxycinnamicacid
aceticacid	isobutyrylglycine	trans-3-hexenedioicacid
acetoaceticacid	isocaproicacid	trans-3-hydroxycinnamicacid
acetone	isocitricacid	trans-aconicacid
acetophenone	isoferulicacid	trans-caffeicacid
acetylcholine	isoglutamine	tricarballicacid
acetyl-L-carnitine	isohomovanillicacid	tricine
adenine	isonicotinicacid	triethanolamine
adenosine	isopropanolamine	trigonelline
adenosine-5-diphosphate	isovalericacid	trimethylamine
adipicacid	isovaleryl carnitine	trimethylamine-N-oxide
agmatine	itaconicacid	tromethamine
alanine	ketoleucine	tropicacid
allantoin	kynurenicacid	tryptamine
allopurinol	kynurenine	tryptophan
alpha-D-glucose	lacticacid	tyramine
alpha-D-mannose-1-phosphate	L-allo-isoleucine	tyrosine

alpha-hydroxyhippuricacid	lanthionine	uracil
aniline	L-dihydrooroticacid	ureidosuccinicacid
anserine	leucine	uridine
anthranilicacid	levulinicacid	uridine-5-monophosphate
arabinose	lipoicacid	urocanicacid
arabitol	L-isoleucine	valericacid
arbutin	L-pyroglutamicacid	valerylglycine
arginine	lysine	valine
ascorbicacid	maleicacid	valproicacid
asparagine	maleimide	vanillicacid
asparticacid	malicacid	vanillin
azelaicacid	mandelicacid	vanilmandelicacid
benzamidine	melatonin	xanthine
benzimidazole	melibiose	xanthopterin
benzoicacid	mesaconicacid	xanthosine
beta-alanine	meso-tartaricacid	xanthurenicacid
beta-D-glucose	methacrylicacid	xylitol
betaine	methanethiol	

AMIX

Aquest programa fa servir el mateix software gestor de llicències que el Topspin, o sigui que es podria demanar una llicència flotant que permetés executar el programa AMIX a qualsevol ordinador autoritzat (caldrà comprovar com restringir l'accés al servidor de llicències).

PERCH Tools for BRUKER Software

Al lloc web de l'empresa desenvolupadora trobareu una [descripció breu del programa](#) i unes senzilles [instruccions d'instal·lació](#) on s'explica com obtenir la llicència d'ús del programa.

<note important> Aquest programa només està disponible per Windows i la llicència només és vàlida per l'ordinador en que s'instal·la. </note>

Sortosament, hi ha una versió gratuïta "The LITE-Edition covering most of the features of previous version is now FREEWARE for academic users." Per més informació consulta [la pàgina de vendes](#) o la pàgina que compara les [característiques de les versions disponibles](#).

Ordinador DataAnalysis/AMIX

Els programes AMIX, Perch Tools i la base de dades BBIOREFCODE s'han instal·lat en un ordinador disponible pels usuaris del SeRMN. La [configuració d'aquest ordinador](#) es pot consultar a la Intranet del SeRMN.

From:

<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:

<https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=bbiorefcode&rev=1243504408>

Last update: **2009/05/28 11:53**

