

Base de dades de metabolòmica BBIOREFCODE

<note important> A finals de 2009 hem rebut una nova versió de la base de dades. La instal·lació ha millorat moltíssim respecte la primera versió que vàrem rebre, tant que les instruccions següents ja no serveixen i s'hauran de substituir. Per ara només he afegit quatre notes breus al principi. </note>

Compra del BBIOREFCODE

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](#).

Instal·lació de la versió 2.0.1 - Novembre 2009

1. Aquesta versió s'instal·la, com la resta de programari Bruker, a través d'un programa d'instal·lació amb interfície gràfica.
2. El DVD inclou una nova versió de l'AMIX, v. 3.0.2
3. Si es vol instal·lar la nova versió de l'AMIX al directori per defecte (C:\Bruker\Aurelia-Amix), cal desinstal·lar prèviament la versió que tinguem instal·lada, altrament el programa d'instal·lació donarà un missatge d'error.
 - A Windows-XP, la versió d'AMIX instal·lada es pot eliminar a través de l'eina *Afegeix o suprimeix programes* disponible al *Tauler de Control*.
 - Un cop desinstal·lat l'AMIX, a la seva carpeta queden fitxers i carpetes relacionats amb el PERCH que no afecten la instal·lació de la nova versió de l'AMIX.
4. El DVD inclou una nova versió de la base de dades BBiorefcodes, agrupada en tres parts:
 - la primera part correspon a la versió anterior 2.0.0, i
 - les parts 2 i 3 contenen nous compostos.
5. La base de dades Biorefcodes s'instal·la per defecte al directori C:\Bruker\bbiorefcodes. Tot i que és possible canviar-ho, el programa d'instal·lació només aplica el canvi de directori a la primera part de la base de dades, mentre que les ampliacions de la base de dades (parts 2 i 3) es continuen instal·lant al directori per defecte. Així doncs, **la recomanació és no modificar el directori d'instal·lació del Biorefcodes**.
6. El programa d'instal·lació comprova si el Firewall de Windows-XP està en funcionament i si cal configurar-ho. En cas de necessitat, demana si es vol configurar. Hores d'ara **la recomanació és respondre que no**, ja que el fitxer de configuració no hi és al DVD i l'intent de fer-ho servir es tradueix en un missatge d'error al final de la instal·lació.

Aquestes notes les hi faré arribar a en Christian per tal que corregeixin aquests errors a la propera

versió.

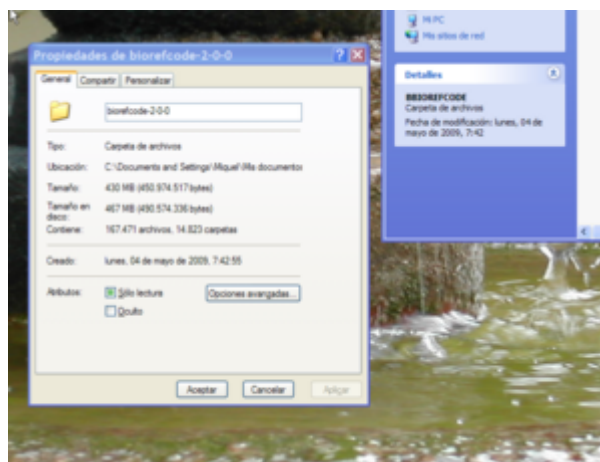
BBIOREFCODE 2-0-0

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	dihydrouracil	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	phenylacetyl glycine
3,4-dihydroxyphenylalanine	ethanol	phenylalanine
3,7-dimethyluricacid	ethanolamine	phenylethylalcohol
3-amino-1,2,4-triazole	ethionine	phenylethylamine
3-aminoadipicacid	ethosuximide	phenylpropionyl glycine
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	furoyl glycine	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	propionyl carnitine
3-hydroxysebacicacid	glucose-D-1-phosphate	propionyl glycine
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-methylcrotonyl glycine	glycine	pyrimidine
3-methylglutaconicacid	glycolicacid	pyrrolidine
3-methylglutaricacid	glycyl-L-leucine	pyruvicacid
3-methylhistamine	glyoxylicacid	quinicacid
3-methylhistidine	guaiacol	quinoline-3-carboxylicacid
3-oxoadipicacid	guanidinoaceticacid	quinolinicacid
3-phenyllacticacid	guanidinopropionicacid	R-adrenaline
3-phenylpropionicacid	guanidinosuccinicacid	resorcine
3-phenylpropionyl glycine	guanosine	ribitol
3-sulfinoalanine	guanosine-5-diphosphate	S-5-adenosyl-L-homocysteine
3-tyramine	guanosine-5-phosphate	salicylicacid
3-ureidopropionicacid	hexanoicacid	salidroside
4-aminobenzoicacid	hexanoyl glycine	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	isethionicacid	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-aconiticacid
acetophenone	isoferulicacid	trans-caffeicacid
acetylcholine	isoglutamine	tricarballicacid
acetyl-L-carnitine	isohomovanillicacid	tricine
adenine	isonicotinicacid	triethanolamine
adenosine	isopropanolamine	trigonelline
adenosine-5-diphosphate	isovalericacid	trimethylamine
adipicacid	isovalerylcarnitine	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=1260806053>

Last update: **2009/12/14 16:54**

