

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 a l'inici de la pàgina. </note>

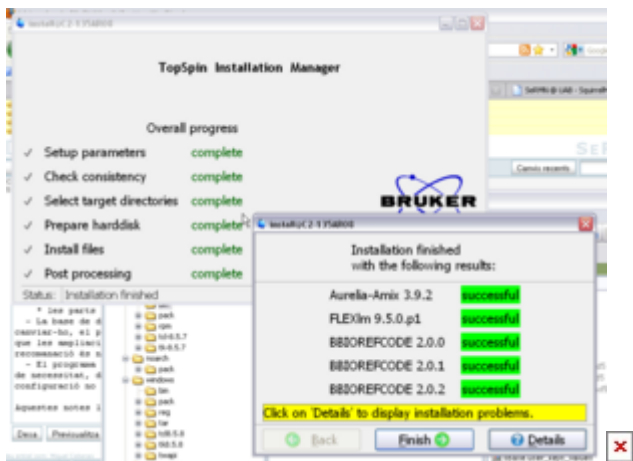
Compra del BBIOREFCODE

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.
7. A l'ordinador de metabolòmica la instal·lació s'ha completat ràpidament i satisfactòria.



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

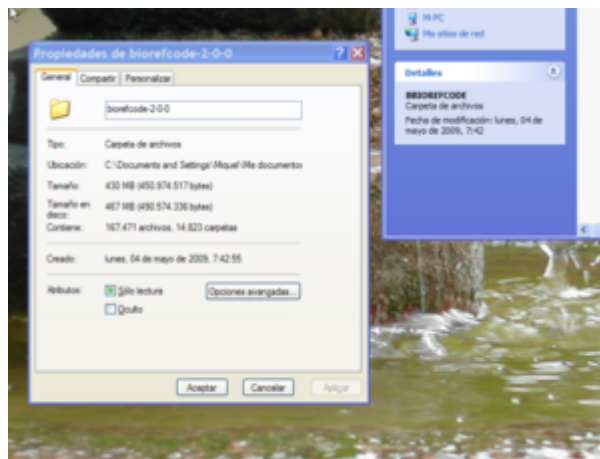
BBIOREFCODE 2-0-0

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 descomprimut 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 | normetanephrine |
| 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 | 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 | guaiacol | quinoline-3-carboxylicacid |
| 3-oxoadipicacid | guanidinoaceticacid | quinolinicacid |
| 3-phenyllacticacid | guanidinopropionicacid | R-adrenaline |
| 3-phenylpropionicacid | guanidinosuccinicacid | resorcine |
| 3-phenylpropionylglycine | guanosine | ribitol |
| 3-sulfinoalanine | 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 | 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=1260806757>

Last update: **2009/12/14 17:05**

