

# 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](#).

## 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               | 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-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                | 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=bbiorefcodes&rev=1267716686>

Last update: **2010/03/04 16:31**

