Sistema de visualização de redes metabólicas em grafo

Gabriella de O. Esteves
Universidade de Brasília
Departamento de Ciência da Computação
Brasília, Brasil
Email: gabepk.ape@gmail.com

Abstract—The abstract goes here.

I. INTRODUCÃO

O metabolismo é isso X, ocorre por isso (síntese e degradação) e funciona com isso (moléculas, metabólitos).

Como o metabolismo tem sido representado computacionalmente (redes metabólicas)? Como as redes metabólicas tem sido visualizadas (estado da arte)?

Problema, objetivo.

Descrição dos capítulos.

II. REDES METABÓLICAS

FRASE INTRO. As reações bioquímicas são alterações químicas que fornecem um ou mais produtos a partir de uma ou mais entradas, chamadas de substratos. Uma via metabólica é uma sequência de reações bioquímicas, cujo produto e subtrato são denominados de metabólitos, que podem ser catalisadas por enzimas, estas que muitas vezes necessitam de compostos químicos não-proteicos chamados de co-fatores para realizarem suas atividades na célula. O conjunto de vias metabólicas de um organismo é chamado de rede metabólica. Todos estes elementos que compõem as redes metabólicas são dados biológicos estudados na área metabolômica. Nesta seção serão apresentados três bancos de dados de redes metabólicas utilizadas em análise do metaboloma, KEGG, BIoCyc e Reactoma.

A. Conceitos de Biologia Molecular

O DNA é um conjunto de biomoléculas em um organismo que armazenam informações, chamados de genes, referentes ao funcionamento de todas as suas células. Ele constitui o genoma em todos os seres vivos, com excessão dos vírus. A expressão dos genes é o processo no qual os genes são filtrados e utilizados na síntese de um produto, geralmente proteína. O método é segmentado em três etapas: transcrição (síntese de RNA mensageiro, mRNA, a partir de DNA), splicing (filtragem do gene síntetizador de proteínas desejadas do mRNA) e tradução (síntese de proteína a partir do mRNA filtrado). Completo este processo, as proteínas resultantes poderão formar uma configuração tridimensional de até quatro níveis. As enzimas, por exemplo, são proteínas que podem ter estrutura terciária ou quaternária.

B. Conceitos de Metabolismo

O papel das enzimas no metabolismo é realizar biosíntese/degradação de moléculas para produção de energia (catalisar) com o propósito de acelerar reações bioquímicas. Aquelas que possuem a mesma atividade enzimática, porém estruturas físicas diferentes são chamadas isoenzimas.

Quando o metabolismo exerce uma função fundamental no organismo, ele é classificado como metabolismo primário. Mitose e meiose são exemplos de metabolismos primários. Já quando o metabolismo não está relacionado a reprodução, desenvolvimento ou crescimento, ele não é essencial no organismo e, portanto, secundário. Os metabólitos secundários, apesar da aparente insignificância, podem ser antibióticos, por exemplo, e deste modo são bastante aplicados na medicina e na indústria.

C. Banco de Dados de redes metabólicas

KEGG. BioCyc. Reactoma.

III. FERRAMENTAS DE VISUALIZAÇÃO DE REDES METABÓLICAS

Ferramenta do KEGG. Ferramentas do BioCyc. Ferramentas do Reactome browser. Ferramentas do Cytoscape.

IV. SISTEMA 2PATH

A. Banco de dados em grafo

Waldeyr

B. Sistema de consulta

Gabriella

V. Conclusão

Conclusão

AGRADECIMENTO

The authors would like to thank...

REFERENCES

[1] H. Kopka and P. W. Daly, A Guide to ETeX, 3rd ed. Harlow, England: Addison-Wesley, 1999.