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

. 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

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

. O KEGG (*Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes*) é um repositório de ferramentas para análise de dados de sistemas biológicos em nível molecular, sobretudo para conjuntos de dados em larga escala gerados por sequenciamento de genoma. Citar:http://www.kegg.jp/kegg/kegg1a.html O sistema é disponibilizado via *web* pelo site *http://www.genome.jp/kegg/*. As informações sobre os sistemas podem ser dadas em forma de módulo, unidades funcionais com identificação otimizada para análise dos dados, em forma de *brite*, coleção de arquivos estruturados hierarquicamente sobre as funções

das entidades biológicos, ou em forma de vias, mapa de interações moleculares e reações químicas. Dado que o metabolismo é um conjunto de reações e transformações químicas, a maneira natural de representá-lo é por meio de uma rede de interações, ou seja, em forma de vias. O KEGG oferece uma ferramenta de busca de vias metabólicas sobre várias rede metabólica, dos vários organismos que constituem o banco de dados. LIGAR PARAGRAFOS.

O BioCyc é um sistema de coleção de aproximadamente 7 mil bancos de dados chamados PGDBs (Pathway/Genome Databases) pois possuem duas maneiras diferentes de representar as informações: modelo de vias metabólicas, que enfatiza as sequências de reações, substratos e produtos de múltiplos organismos, ou modelo de sequência genômica, que destaca a localização e descrição dos genes de cada organismo específico. Citar: http://biocyc.org/ . Os bancos PGDBs são organizado em três camadas de acordo com a frequência de atulizações/refinações e da maneira com que os dados foram obtidos. O BioCyc possui um banco de dados específico para redes metabólicas determinadas experimentalmente, chamado MetaCyc. LIGAR PARAGRAFOS. AAAAAAA AAAAAAA AAAAAAA AAAAAAAA AAAAAAAAA AAAAA AAAAAA AAAAAA AAAAA AAAAA AAAA AAAAA AAAAAAAA

Reactoma é um banco de dados de reações de mudança de estado (não só reações bioquímica, mas também reações de ativação, de degradação e de ligação, por exemplo) Citar:http://wiki.reactome.org/index.php/Usersguide. No sistema existe uma rede geral para cada organismo que representa os vários seus sistemas, como reprodução e metabolismo. Algumas subredes estão conectadas (por exemplo, replicação de DNA e ciclo de célula), outra não (por exemplo, contração muscular e reprodução). Nesta rede, cada nó representa uma via cujo número de entidade se reflete no raio do nó, e cada aresta representa a relação entre estas vias. O site ainda possui uma ferramenta de análise de dados baseada nas correspondências entre as reações na redes dos organismos comparados.

III. FERRAMENTAS DE VISUALIZAÇÃO DE REDES METABÓLICAS

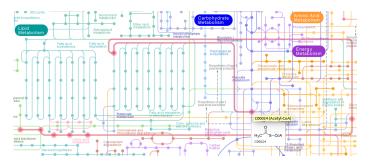


Figure 1. KEGG

A. KEGG

O KEGG oferece uma visao geral e uma visualização específica para análise de redes metabólicas. Na primeira, o grafo interativo apresenta uma perspectiva global das entidades do banco de dados do KEGG, chamadas de objetos KEGG. Neste panorama, a rede metabólica selecionada é destacada e é acompanhada de interações externas, que não possuem ligação direta com a rede análisada. Os nós representam compostos químicos e as arestas podem representar enzimas, reações e/ou otholog. Na página do Atlas, a visualização das arestas pode ser filtrada, bem como as vias, de acordo com suas funções. A Figura 1 apresenta uma parte da via de biosíntese de terpenóide, que tem início no composto Acetyl-CoA, destacada sobre as demais.

Uma outra maneira de visualizar esta via é acessando o objeto KEGG do tipo map que ela representa. O mapa de vias é um diagrama de interações/reações moleculares desenhado manualmente. A via da Figura 2 apresenta a mesma via da Figura 1.

PATHWAY específico: Biosíntese do backbone do Ter-

penoide

BOLINHA: Composto Retangulo: EC da enzima

B. BioCyc

C. Reactome

D. 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

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

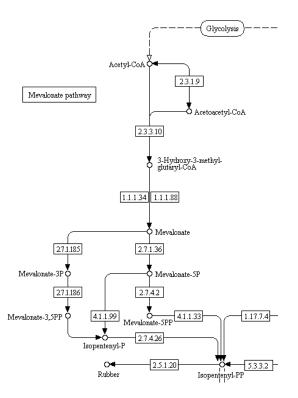


Figure 2. KEGG

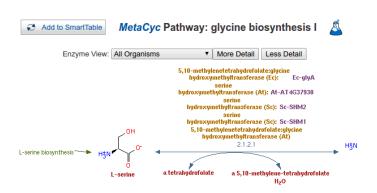


Figure 4. BioCyc



Figure 3. BioCyc

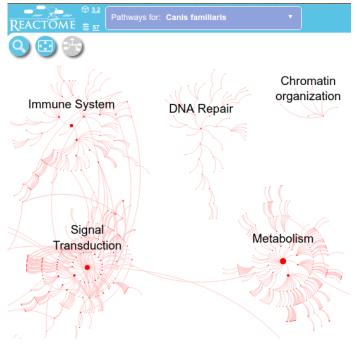


Figure 5. Reactome