

# 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. INTRODUÇÃO

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 substrato 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 exceção 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* (filragem do gene sintetizador 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.

**FALAR DE SEQUENCIAMENTO DE GENOMA**

### 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. **LIGAR PARAGRAFOS.**

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

**FRASE INTRO.** 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.genome.jp/kegg/> 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 biológicas, 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 dois modelos diferentes: em vias, que enfatiza as sequências de reações, substratos e produtos de múltiplos organismos, ou em 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 atualizações/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.

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 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X*, 3rd ed. Harlow, England: Addison-Wesley, 1999.