Mestrado em Bioinformática

Ano Letivo 2014/2015

Docentes: Prof. Miguel Rocha



**Grafos para a Criação de Redes Metabólicas usando a BD do KEGG**

Algoritmos Avançados de Bioinformática

**Grupo 3:**

**Daniel Oliveira (PG27667)**

**Jorge Reis (PG26544)**

**Raquel Silva (PG27668)**

**Introdução Teórica**

A aplicação do método matemático, teoria dos grafos, para perceber redes biológicas metabólicas tem potenciais aplicações como por exemplo a identificação de drug target, atribuir funções a genes ou proteínas ou diminuir o tempo de atribuição de uma patologia a um diagnóstico médico.

A análise dos nós é de grande importância numa rede metabólica. Se o nó tiver bastantes ligações, ou seja nós sucessores e predecessores, levará a uma centralidade nesse nó, pois caso haja a remoção deste, várias reações não se irão realizar tal como metabolitos que não serão sintetizados. Este vértice pode ser necessário para o metabolismo, conseguindo ser identificado através das suas conexões.

Para quantificar a coesão de um nó num grupo é medido o coeficiente de clustering que se define pelo número de arcos existentes entre vizinhos do nó e numero total de arcos que poderiam existir entre vizinhos do nó.

**Desenvolvimento**

Num primeiro ponto a intenção seria criar redes metabólicas e regulatórias, mas devido à informação retirada do KEGG não apresentar as ligações entre genes e proteínas ou mesmo os compostos num formato de texto, sendo apresentada em imagem, não foi possível realizar esta última rede. Para retirar a informação contida no KEGG foi necessário recorrer a um package chamado bioservices.

De modo a facilitar o processo utilizamos como identificadores os *pathway modules* do organismo *Homo sapiens,* sendo possível alterar o organismo. Portanto é possível criar várias redes metabólicas de diferentes *pathways*. O nosso programa permite a escolha entre a utilização de todos os *modules* ou alguns específicos colocando como input no menu, criando assim redes de diferentes tamanhos.

A nossa classe apresenta métodos para criar diferentes tipos de redes metabólicas, sendo redes de metabolitos, de reações ou de metabolitos e reações. Como também diferentes análises da rede, sendo calcular o grau dos nós, o coeficiente de clustering e a distância entre dois vértices (número de nós visitados incluindo o último).

É possível visualizar os nomes dos metabolitos, *modules pathways* e *pathways.*

Os diferentes métodos apresentados podem ser escolhidos no menu, sendo possível escolher todos ou apenas alguns tal como repeti-los, caso necessário.