

## MetaPenta: visualización y análisis de redes metabólicas

**Valerie Parra Cortés, Jorge Duitama**

**Departamento de Ingeniería de Sistemas y Computación, Universidad de los Andes,  
Bogotá, Colombia**

[v.parrac@uniandes.edu.co](mailto:v.parrac@uniandes.edu.co)

El conjunto de todas las reacciones que ocurren en una célula se denomina red metabólica. La secuenciación masiva de genomas completos permite actualmente predecir automáticamente reconstrucciones de redes metabólicas para una gran cantidad de especies. Sin embargo, en la construcción automatizada de un modelo de red metabólica se pueden generar varios tipos de inconsistencias, las cuales deben ser resueltas siguiendo procesos de curación. Una vez se realizan estos procesos, las redes metabólicas se puede analizar para encontrar rutas eficientes para producir nuevos metabolitos. Algunas soluciones implementadas para estos dos problemas incluyen los algoritmos de *gap find* y *gap fill* para curación y *k-shortest path* para identificación de rutas. Sin embargo, la mayoría de las herramientas existentes se implementan como scripts para ser ejecutados en herramientas como GAMS.

En este resumen se describe el desarrollo de la herramienta *MetaPenta*, para visualización y análisis de redes metabólicas. *MetaPenta* es capaz de realizar diferentes consultas sobre reconstrucciones automatizadas de redes metabólicas, incluyendo la identificación de metabolitos no producidos o no consumidos y la identificación de rutas cortas de producción de metabolitos. Se utiliza una red de Petri como modelo básico para la representación y visualización de las reacciones. Esto permite retener mejor la información completa de metabolitos que intervienen en una reacción, si se compara con herramientas que implementan grafos dirigidos como *Fluxer*. La arquitectura utilizada sigue un patrón modelo vista control (MVC) implementado con las tecnologías Java 11.0.7, Processing 2.0 y JavaFX 15. Esto facilita la mantenibilidad y evolución de *MetaPenta*. Además de esto *MetaPenta* recibe la información en formatos estándar como XML, lo cual es una ventaja en comparación con otras herramientas.

Se compararon los resultados de *MetaPenta* con otros desarrollos de software. Se compararon las funcionalidades para solucionar los problemas de *root no production* y *root no consumption* con los *scripts* del grupo de Costas Maranas. En cuanto a la salida, para el problema de *gap find*, GAMS usa un balance de masa y energía mientras que *MetaPenta* usa una exploración sobre la red de Petri y no tiene en cuenta la reversibilidad de las reacciones. Se corrió el análisis en ambas herramientas usando el modelo de *e-coli*. Ambas identifican un total de 23 metabolitos problemático. Sin embargo, sólo coinciden en 21, lo cual puede deberse principalmente a las diferencias ya mencionadas. Adicionalmente, se contrastaron las funcionalidades para encontrar caminos más cortos para producción de metabolitos en las herramientas *MetaPenta* y *Fluxer*. Se utilizó específicamente la ruta de *Cis-Aconitate* a *2-Oxoglutarate*. Ambos programas encuentran exactamente la misma ruta, pero la representan de manera diferente. La visualización como red de Petri de la red ofrece menos pérdida de información comparado con *Fluxer*, ya que, por ejemplo, *MetaPenta* permite ver metabolitos intermedios de las rutas encontradas, las enzimas involucradas en las reacciones y las otras reacciones de la red donde el metabolito participa como sustrato o producto.

Esperamos del desarrollo de MetaPenta sea de gran utilidad para diferentes grupos de investigación trabajando en reconstrucción y análisis de redes metabólicas en diferentes especies.