

LECBANK: CONSTRUINDO UM BANCO DE DADOS ONLINE PARA INFORMAÇÕES DE LECTINAS

KREMER, Frederico Schmitt¹; ESLABÃO, Marcus Redü¹ PINTO, Luciano da Silva²

¹universidade Federal de Pelotas, Graduação em Biotecnologia; ²Universidade Federal de Pelotas, Centro de Desenvolvimento Tecnológico.
fred.s.kremer@gmail.com.

1 INTRODUÇÃO

Lectinas são proteínas que apresentam em sua estrutura um sítio capaz de se ligar de forma específica e reversível a um ou mais carboidratos (PEUMANS & VAN DAMME, 1995). Estas moléculas, presentes em uma grande variedade de organismos (LAKHTIN *et al*, 2011), desempenham diversos papéis na defesa contra patógenos em plantas (PEUMANS & VAN DAMME, 1995) e animais (KERRIGAN & BROWN, 2008), além de atuarem como intermediários em diversas vias de sinalização (BOSCHER *et al*, 2011), como reconhecimento e crescimento celular e processos oncológicos (RAMBARUTH *et al*, 2011). Esta capacidade de exercer efeitos biológicos as torna um importante foco de estudo para a prospecção de insumos biotecnológicos, sendo já conhecidas aplicações para diversas lectinas. Dentre estas possíveis aplicações podemos citar o uso como, bioinseticidas (TRIGUEROS *et al*, 2003), insumos laboratoriais (KATRLÍK *et al*, 2010) e agentes antitumorais (LI *et al*, 2011)

O aumento do volume de dados disponíveis sobre estas moléculas tornou necessário o desenvolvimento de novas ferramentas para facilitar a busca por estas informações. Atualmente, bancos de dados online específicos para lectinas já estão disponíveis, como o Lectindb, direcionado para lectinas de plantas (CHANDRA *et al*, 2006), o ALDb, direcionado para lectinas de animais (KUMAR & MITTAL, 2011) e BacterialectinDb, dedicado ao armazenamento de dados sobre lectinas de bactérias (KUMAR & MITTAL, 2012). Entretanto, estes mesmos bancos de dados ainda fornecem poucas ferramentas para comparação destas informações, o que estimula o desenvolvimento de novos repositórios.

O objetivo do presente trabalho é apresentar o desenvolvimento de um novo banco de dados para lectinas, capaz de fornecer um *dataset* maior em relação aos disponíveis atualmente e ferramentas de bioinformática para a análise e comparação das informações.

2 METODOLOGIA (MATERIAL E MÉTODOS)

A interface gráfica do *website* está sendo desenvolvida em linguagem HTML, utilizando também recursos gráficos CSS. O banco de dados foi construído utilizando o servidor SQL *Firebird 2.1* (Firebird 2.1 SQL Server, 2012). O CGI (*Common Gateway Interface*), que permite a comunicação entre o banco de dados e o *website*, está sendo desenvolvido utilizando linguagem *Object Pascal*, sendo usado para isto a IDE *Lazarus* (FreePascal Lazarus, 2012) e o pacote *Zeoslib* (ZeosLib, 2012). A comunicação entre o CGI e o *website* é feita através de formulário *post*. O sistema roda sobre um servidor Apache HTTP (Apache HTTP Server 2.2, 2012).



Figura 1. Interface gráfica do Lecbank, gerada em HTML e CSS.

Em sua página inicial (Fig. 1) o *Lecbank* possui um campo de busca por palavras-chave, como nome da lectina de interesse, organismo de origem e grupos taxonômicos. O formulário gerado por este campo é enviado para o CGI, onde será feita a filtragem via SQL. O CGI retorna os resultados em uma página HTML contendo os nomes das lectinas presentes em nosso *dataset* que correspondem a busca, assim como um *link* para uma nova página onde é possível visualizar os “perfis” de cada lectina (*Lecbank Profile*). Esta página contém todas as informações referentes à proteína de interesse presentes em nosso banco de dados.

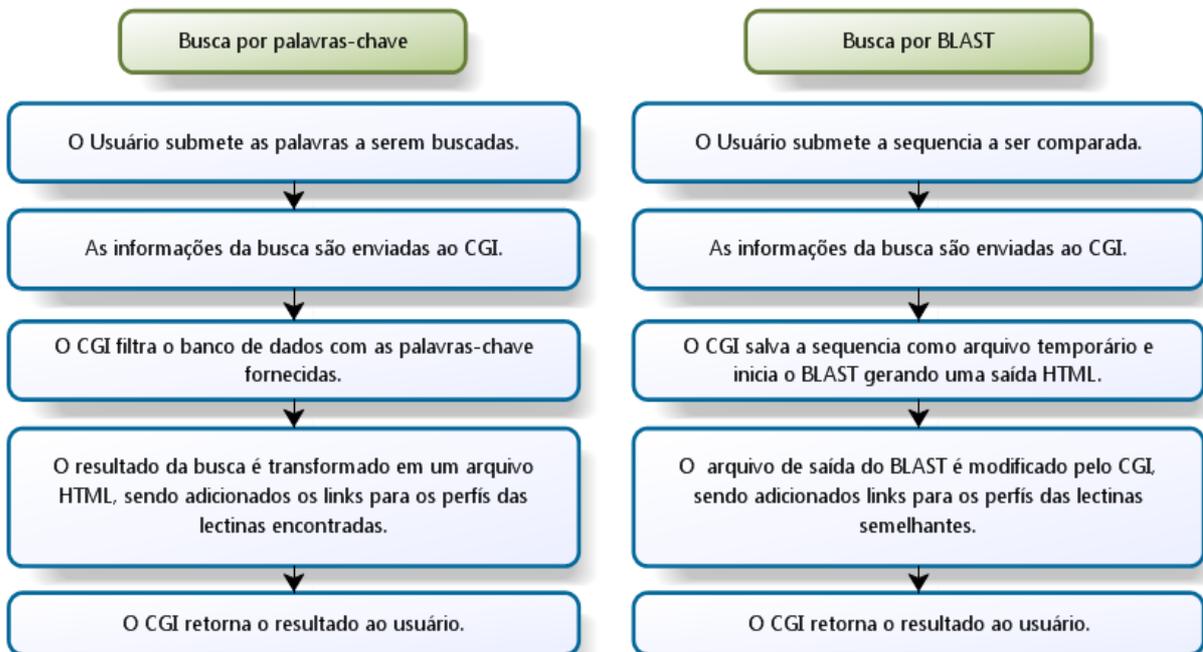


Figura 2. Representação do fluxo de informação durante a busca por palavras-chave e por BLAST no *Lecbank*.

Além da busca por palavras-chave o Lecbank também disponibilizará um sistema de busca pelo algoritmo BLAST (ALTSCHUL *et al*, 1991). Este ferramenta, acessível através do *menu* superior, redireciona o usuário para uma página contendo um campo onde será inserida a sequência a ser comparada (*query*), havendo também uma janela para escolha do sub-programa a ser rodado (BLASTn, BLASTp ou BLASTx). O resultado é carregado em uma página HTML contendo o *output* pelo programa gerado e *links* para o *Lecbank Profile* das lectinas semelhantes. Os fluxos de informação em ambos os sistemas de busca podem ser visualizados na Fig. 2.

Por fim, além de sistemas de busca, um painel de ferramentas para análise online dos dados também está sendo adicionado ao *website*. Este painel, denominado *Lecbank Workbench*, também acessível pelo menu superior, conterá inicialmente os algoritmos Needleman–Wunsch (NEEDLEMAN & WUNSCH, 1970), Smith–Waterman (SMITH & WATERMAN, 1981) e MUSCLE (EDGAR, 2004). Estas ferramentas permitirão à manipulação e comparação de informações de forma eficiente e rápida, sem o usuário precisar rodar as análises em seu próprio computador.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O CGI do *Lecbank* ainda está em construção, sendo necessários diversos ajustes e implementações. O banco de dados contém uma quantidade limitada de informações, inseridas unicamente para os testes dos sistemas de busca, que já se mostram funcionais. Após a finalização de uma versão instável de nosso CGI, o próximo passo será a criação de um *dataset* com dados derivados dos bancos de dados públicos, sendo feita uma curadoria manual de cada entrada de forma a garantir a consistência dos dados importados. Estamos trabalhando para que uma versão *beta* seja disponibilizada no domínio <http://lepbank.ufpel.edu.br/lecbank> ainda no segundo semestre de 2012. Esta primeira versão incluirá os sistemas de busca por palavras-chaves e por BLAST, o *lecbank workbench* e informações curadas de um conjunto de lectinas ainda a ser definido.

4 CONCLUSÃO

O *Lecbank* se mostra uma ferramenta promissora nos estudos envolvendo dados de lectinas, visto que em seu projeto está previsto não apenas um sistema de armazenamento e busca de dados curados, mas também ferramentas para a manipulação dos mesmos. Desta forma, pesquisadores do mundo todo terão a sua disposição informações confiáveis de lectinas e também ferramentas para análises de bioinformática, como alinhamento local e global de sequências de proteínas e nucleotídeos, em um único local.

5 REFERÊNCIAS

ALTSCHUL, Stephen F; GISH, Warren; MILLER, Webb; Myers, Eugene W; LIPMAN, David J. Basic Local Alignment Search Tool. **Journal of Molecular Biology**. U.S.A, v. 215, n. 3, 403 - 410, 1991.
Apache HTTP Server 2.2. Disponível em: <<http://httpd.apache.org/>>. Acesso em: 07 de julho de 2012.

- BOSCHER, Cecile; DENNIS, James W.; NABI, Ivan R. G. Glycosylation, galectins and cellular signaling. **Current Opinion in Cell Biology**. v. 23. 383 - 393, 2011.
- EDGAR, Robert C. MUSCLE: multiple sequence alignment with high accuracy and high throughput.. **Nucleic Acids Research**. U.S.A, v. 32, n. 45, 1792 - 1797, 2004.
- Firebird 2.1 SQL Server, Disponível em: <<http://www.firebirdsql.org/>>. Acesso em: 11 de julho de 2012
- Freepascal Lazarus. Disponível em: <<http://www.lazarus.freepascal.org/>>. Acesso em: 4 de julho de 2012.
- KATRLÍK, Jaroslav; SVITEL, Juraj; GERMEINER, Peter; KOZAR, Tibos; TKAC, Jan. Glycan and lectin microarrays for glycomics and medical applications. **Medicinal Research Reviews**. V. 30, n. 2, 394 – 418, 2010.
- KERRIGAN, Ann M.; BROWN, Gordon D. C-type lectins and phagocytosis. **Immunobiology**. V. 81, 9 – 21, 2009.
- KUMAR, Dharmendra; MITTAL, Yashoda. AnimalLectinDb: An integrated animal lectin database. **Bioinformatics**. v. 6, n. 3, 134 – 136, 2011.
- KUMAR, Dharmendra; MITTAL, Yashoda. BacterialLectinDb: An integrated bacterial lectin database. **Bioinformatics**. v. 8, n. 6, 281 – 283, 2012.
- LAKHTIN, Vladimir; LAKHTIN, Mikhail; ALYOSHKIN. Lectins of living organisms. The overview. **Anaerobe**. Russia, v. 17, n. 6, 452 - 455, 2011.
- LI, Wen-wen; Yu, Jia-ying; XU, Huai-long; BAO, Jin-ku. Concanavalin A: A potential anti-neoplastic agent targeting apoptosis, autophagy and anti-angiogenesis for cancer therapeutics. **Biochemical and Biophysical Research Communications**. V. 414, 282-286, 2011.
- CHANDRA, Nagasuma; KUMAR, Nirmal; JEYAKANI, Justin; SINGH, Desh Deepak; GOWDA, Sharan B; PRATHIMA, M. N. Lectindb: a plant lectin database. **Glycobiology**. V. 16, n. 10, 938 – 946, 2006.
- NEEDLEMAN, Saul B; WUNSCH, Christian D. A general method applicable to search for similarities in the amino acid sequence of two proteins. **Journal of Molecular Biology**. U.S.A, v. 48, n. 3, 443 - 453, 1970.
- PEUMANS, W.J.; VAN DAMME, E.J. Lectins as plant defense proteins. **Plant Physiology**, v.109, n.2, p.347-352, 1995.
- RAMDARUTH, Neela D.S; DWEK, Miriam V. Cell surface glycan-lectin interactions in tumor metastasis. **Acta Histochemia**. v. 113, 591 - 600, 2011.
- SMITH, Temple F.; WATERMAN, Michael S. Identification of Common Molecular Subsequences. **Journal of Molecular Biology**. U.S.A v. 48, n. 1. 195-197, 1981.
- TRIGUEROS, Véronique; LOUGARRE, Andrée; ALI-AHMED, DJAMILA; RAHBÉ, Yvan; GUILLOT, Jean; CHAVANT, Louis; FOURNIER, Didier; PAQUEREAU, Laurent. *Xerocomus chrysenteron* lectin: identification of a new pesticidal protein. **Biochimica et Biophysica Acta**. V. 1621, 292-298, 2003.
- ZeosLib. Disponível em: <<http://zeos.firmos.at/>>. Acesso em: 10 de julho de 2012.