

МОДЕЛИРОВАНИЕ АНАЭРОБНОГО МЕТАБОЛИЗМА *RHODOBACTER SPHAEROIDES* МЕТОДОМ БАЛАНСА СТАЦИОНАРНЫХ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ ПОТОКОВ

Голомысова А.Н., Иванов П.С.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический ф-т, каф. биофизики, Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, дом 1, стр. 2

Метаболизм пурпурной несерной бактерии *Rhodobacter sphaeroides* является примером высокого разнообразия сценариев функционирования одиночной клетки. Эта бактерия способна жить как в присутствии кислорода, так и в анаэробных условиях, фототрофно с разнообразными донорами электронов или путем брожения. Кроме того, она рассматривается в качестве потенциального промышленного производителя полигидроксibuтирата и водорода. Изучению жизнедеятельности этой бактерии посвящено множество работ, и *R. sphaeroides* является мишенью многих исследований, связанных с выключением отдельных генов. Тем не менее, детальной математической модели метаболизма этой бактериальной клетки до последнего времени создано не было.

В настоящей работе представлен вариант такой модели, основанный на методе баланса стационарных метаболических потоков (БСМП). БСМП позволяет по известной стехиометрии биохимических реакций построить модель метаболизма клетки в предположении стационарности. В последнее десятилетие с его помощью было создано несколько стехиометрических моделей бактериальных клеток. Центральным моментом такого подхода является необходимость выбора так называемой целевой функции, симулирующей «цель» жизнедеятельности клетки. В то время как в мировой практике принято выбирать в этом качестве прирост биомассы, нами была предложена другая целевая функция – скорость поглощения света, более адекватно отражающая потребности клетки при анаэробном метаболизме.

Методом БСМП авторами построена стехиометрическая модель фотогетеротрофного метаболизма *R. sphaeroides* в стационарном приближении. Она включает в себя все центральные метаболические пути бактериальной клетки (гликолиз, цикл трикарбоновых кислот, цикл Кальвина), а также пути биосинтеза аминокислот, липидов, бактериохлорофилла, каратиноидов, полигидроксibuтирата и водорода. Показано, что результаты моделирования фотогетеротрофного роста бактерии на ацетате хорошо согласуются с экспериментальными значениями для известных потоков метаболитов, что позволяет говорить об адекватности построенной модели реальным клеточным процессам. Эта модель позволит расширить наши знания о жизнедеятельности пурпурной бактерии в анаэробных условиях, а также изучить возможные пути воздействия на ее функционирование.