

## ЗАСТОСУВАННЯ СТЕХІОМЕТРИЧНИХ ІМІТАЦІЙНИХ МОДЕЛЕЙ МАСОВОЇ ДІЇ В БІОТЕХНОЛОГІЇ

І.Р. Яригіна<sup>1</sup>, А.П. Белінська<sup>2</sup>

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», Харків, Україна

<sup>1</sup>студент, [irina.yary33341@gmail.com](mailto:irina.yary33341@gmail.com)

<sup>2</sup>доцент кафедри біотехнології, біофізики та аналітичної хімії, [anna.bielinska@kphi.edu.ua](mailto:anna.bielinska@kphi.edu.ua)

Історично, головним завданням обчислювальної системної біотехнології було створення кінетичних моделей, які враховують декілька одночасних ферментативних функцій. Зазвичай дослідники вирішували це завдання, розробляючи закони швидкості для кожного виду ферментів в системі, в подальшому поєднуючи їх для створення рівнянь динамічного балансу маси. Цей підхід відображає фрагментну конструкцію, засновану на законах швидкості ферментації. Біологічні процеси за своєю природою є динамічними, особливо в організмах вищого порядку, які демонструють широку часову ієрархію у своїх динамічних реакціях. Динамічна характеристика клітинних процесів є особливо актуальною для цих організмів через патофізіологічні процеси, які можуть порушити нормальну послідовність метаболічних реакцій [1, 2].

Кінетичні моделі традиційно будуються з використанням законів швидкості для всіх ферментів, що враховуються в мережі, в умовах *in vitro*. З цим процесом пов'язано багато проблем, починаючи від масштабованості до фундаментальних проблем щодо того, наскільки добре функція *in vitro* відповідає функції *in vivo* [3].

Доступність метаболомічних даних, крім нових розробок у формальному описі динамічних станів мереж, дозволила використовувати новий підхід до інтеграції даних для побудови великомасштабних кінетичних мереж [1].

N. Jamshidi and V. Palsson у своїй роботі [2] показали, що динамічні мережеві моделі можна побудувати масштабованим способом, використовуючи метаболомічні дані, зіставлені зі стехіометричними моделями, що призвело до появи моделей стехіометричного моделювання масової дії (MASS). Цей підхід включає пряме стехіометричне представлення регуляторних ферментів, а також омічні (метаболомі, флюксомні та протеомні) дані, коли така інформація доступна. Ця початкова оцінка *in silico* тягне за собою визначення процесу побудови моделі та його поетапну реалізацію для побудови моделі метаболічної мережі, яка явно враховує регуляторні ферменти та всі їх пов'язані стани як компоненти мережі [4].

Результатом даних досліджень є процес побудови моделей масових дій, що базуються на даних та використовують стехіометричні симуляції (моделі MASS), які ґрунтуються на відображенні висхідних даних оміки на низхідні реконструкції мереж. Формулювання задачі та кроки побудови виконуються таким чином, щоб зробити їх придатними для методів COBRA для подальшого розвитку та аналізу [4].

Кроки для побудови таких моделей виглядають наступним чином:

1. Формулювання конкретних завдань з розподілу потоків в метаболічних мережах.
2. Визначення концентрацій метаболітів у стійких станах системи.
3. Апроксимація констант рівноваги між різними реагентами та продуктами реакцій.
4. Розв'язання системи лінійних рівнянь для визначення швидкостей прямих реакцій у системі.

У подальшому константи швидкості можна використовувати для формулювання моделей MASS, що характеризують динаміку мережі на певному стані рівноваги, для якого були доступні дані [4]. Ці кроки спрямовані на створення математичної моделі, яка відображає взаємозв'язки між різними метаболічними шляхами та реакціями в біологічних системах. Це дозволяє аналізувати та прогнозувати різноманітні аспекти функціонування цих систем з метою подальшого вдосконалення біотехнологічних процесів.

Практична можливість побудови моделей MASS є засобом збільшення розміру, обсягу та прогностичних можливостей динамічних мережеских моделей в клітинній та молекулярній біології. Помилки та неповнота даних завжди лишатимуться актуальними у біології. Однак, за рахунок масштабованості та гнучкості моделей MASS, а також їх залежності від високопродуктивних даних *in vivo*, є підстави вважати, що ці моделі можуть бути застосовані на великих і навіть геномних масштабах. Ці моделі можуть бути використані для вивчення динаміки метаболічних мереж, аналізування впливу регуляторних механізмів на метаболізм та прогнозування поведінки біологічних систем.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Gravel R.A. The metabolic and molecular basis of inherited disease // (No Title). 2001: 3827.
2. Jamshidi N., Palsson B. // PLoS computational biology. 2008.
3. Teusink B. et al. // European journal of biochemistry. 2000. 267(17): 5313-5329.
4. Jamshidi N., Palsson B. // Biophys J. 2010. 98(2): 175-85.

### **ВПЛИВ ТАКИХ ФАКТОРІВ, ЯК ЕКОМОРФІЧНА ПРИНАЛЕЖНІСТЬ І РОЗМІРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, НА ЗДАТНІСТЬ ХИЖАКІВ-ГЕНЕРАЛІСТІВ ЗДІЙСНЮВАТИ КОНТРОЛЬ ПЩАНОГО ЧОРНИША *OPATRUM SABULOSUM* (COLEOPTERA: TENEBRIONIDAE)**

С. Назімов

Мелітопольський державний педагогічний університет ім. Богдана Хмельницького,  
Мелітополь, Україна  
аспірант, [sergdnipro@gmail.com](mailto:sergdnipro@gmail.com)

На сьогодні застосування інсектицидів та інших пестицидів є найпоширенішими засобами для здійснення контролю популяцій шкідливих організмів. Однак, їх масове використання завдає значної шкоди навколишньому середовищу, зменшуючи біологічне різноманіття природних екосистем, особливо водних, а також є небезпечним для здоров'я населення. Також важливою є проблема безконтрольного використання пестицидів, без слідування технології їх застосування. Через ці фактори формуються популяції шкідливих організмів, які є резистентними (стійкими) до основних існуючих на ринку пестицидів. Виробники сільськогосподарської продукції давно стикаються із проблемами стійкості популяцій таких шкідників, як томатна мінуюча міль [1], західний квітковий трипс [2], оранжерейна білокрилка [3], західний кукурудзяний жук [4]. Проте ця проблема може бути значною мірою вирішена шляхом застосування біологічного методу контролю шкідників. Це надзвичайно широка галузь, яка включає в себе застосування широкого спектру грибкових, бактеріальних та вірусних препаратів (так звані біофунгіциди, біоінсектициди та ін.), так і численних безхребетних організмів (здебільшого хижих комах та кліщів) [5]. На відміну від традиційного застосування пестицидів такий метод виключає виникнення резистентності, оскільки ґрунтується на трофічних взаємозв'язках «хижак-жертва» [6]. Не дивлячись на те, що багато ентомофагів, які активно застосовуються у сільському господарстві є досить спеціалізованими, щодо вибору жертв видами, хижаки широкого профілю (хижаки-генералісти) також відіграють вагомий роль у біологічному методі захисту рослин [7]. Хижаки-поліфаги *Atheta coriaria*, *Macrolophus pygmaeus*, *Stratiolaelaps scimitus*, *Chrysoperla carnea* ефективно захищають культури від шкідників в режимі реального часу [8]. Хоча зараз успішне застосування ентомофагів здійснюється, насамперед, в умовах захищеного ґрунту, поліфаги безумовно здатні ефективно працювати і у відкритому ґрунті, про що свідчить ряд