

## **ДИСКРЕТНАЯ ПО ПРОСТРАНСТВУ И ВРЕМЕНИ АГЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА**

**Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Маслаков А.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, [styx@biophys.msu.ru](mailto:styx@biophys.msu.ru)

Для установления взаимосвязи морфологических изменений хлоропластов с наблюдаемыми изменениями функциональных параметров разработана математическая модель, позволяющая воспроизвести динамику редокс-превращений компонентов фотосинтетической электрон-транспортной цепи с явным учетом диффузии подвижных переносчиков электрона в сложном интерьере внутрихлоропластного пространства. Модель построена на основе упрощенной аналитической геометрии грани и окружающих ее стромальных ламелл, воспроизводящей наблюдаемую в эксперименте ультраструктуру и позволяющей варьировать форму компартментов изменением числовых параметров, что позволяет использовать ее для установления взаимосвязи морфологических изменений хлоропластов с наблюдаемыми изменениями функциональных параметров. Модель реализована в виде программы на языке программирования Python и является дискретной по времени и пространству.

Пространство внутри хлоропласта разбивается на ромбододекаэдрические ячейки объемом  $2 \text{ нм}^3$ , используются тороидальные (периодические) граничные условия. Каждой ячейке присваивается идентификатор компартмента: строма, люмен либо тилакоидная мембрана. Предполагается, что состоящая из сближенных цилиндрических тилакоидов грана «пронзает» стромальные ламеллы, при этом в области контакта формируются переходные спиральные структуры.

Модель построена по принципу клеточного автомата, белковые молекулы занимают несколько соседних ячеек, их форма задается по данным рентгеноструктурного анализа или криоэлектронной микроскопии. Одна или несколько ячеек вблизи поверхности трансмембранных комплексов задаются как активные сайты, попадание в которые подвижных переносчиков электрона приводит к запуску программы, анализирующей это взаимодействие.

Каждый из агентов модели может находиться в одном из нескольких редокс-состояний. То, каким образом происходят переходы между состояниями агентов, определяется заданной для каждого типа агентов программой, таким образом, можно легко изменять степень детализации процессов, происходящих в каждом из агентов, независимо от других агентов. Рассмотрена система, в которой все процессы электронного транспорта между трансмембранными комплексами моделировались как необратимые диффузионно-контролируемые. Несмотря на простоту, такая модель позволила воспроизвести основные особенности наблюдаемых в экспериментах кривых при использовании небольшого числа настраиваемых параметров.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №20-04-00465 и РНФ №22-11-00009.