



Modelo metabólico a escala genómica de células de *Thevetia peruviana* cultivadas en suspensión.

Genome-scale metabolic of *Thevetia peruviana* cells cultivated in suspension.

Angie ORTEGA¹, Dary MENDOZA¹, Rigoberto RIOS², Mario ARIAS²

1. Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Universidad del Atlántico. Barranquilla, Colombia. darymendoza@mail.uniatlantico.edu.co
2. Grupo de Biotecnología Industrial. Escuela de Biociencias. Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Colombia. Medellín, Colombia.

Presentación Poster Presencial 10

ABSTRACT

Thevetia peruviana is an ornamental plant source of several secondary metabolites with pharmaceutical applications. Biosynthetic pathways to produce secondary metabolites have been studied in several plant models. A metabolic model for *T. peruviana* has not been published so far. This work aims to develop a genome-scale model (GSM) that contributes to the understanding of the metabolic capabilities of *T. peruviana* cells. The GSM is an in silico, stoichiometric model that encompasses many reactions and metabolic pathways known for a specific plant cell. The GSM was reconstructed using a stoichiometric matrix, which represented the ratios between metabolites synthesized and consumed in each reaction considered for the model. Identification of pathway systems was performed by analyzing online information and databases and included 537 metabolites, 592 reactions in three compartments (cytosol, mitochondrion, plasmid). The model and simulations were built using the free software tool COBRA running in MATLAB®. Although the model clearly represented the carbon flux through the central metabolism, it was modest for comprehension of the carbon distribution through the biochemical reactions involved in the secondary metabolism of *T. peruviana* (synthesis of cardiotonic glycosides and flavonoids) and for understanding the metabolic response of the cell to external perturbations. Currently, we are working on the refinement to achieve a useful predictive model for the academic community involved in the field.

Key words:

Thevetia peruviana, metabolic model, carbon flux, flavonoids, cardiac glycosides.

RESUMEN



Revista Productos Naturales

ISSN 1916-2413



XIV Congreso Colombiano de Fitoquímica

Julio 27, 2022, 5(2):133-135

Disponible en línea en

<https://nozomiscience.org/index.php/rpn/article/view/6889/version/7647>

doi: <https://doi.org/10.3407/rpn.v5i2.6889>



Thevetia peruviana, es una planta ornamental fuente de varios metabolitos secundarios, con aplicaciones farmacéuticas. Las vías biosintéticas para la producción de metabolitos secundarios, se han estudiado en varios modelos de plantas. Hasta el momento no se ha publicado un modelo metabólico para *T. peruviana*. Este trabajo tiene como objetivo, desarrollar un modelo a escala genómica (GMS) que contribuya a la comprensión de las capacidades metabólicas de las células de *T. peruviana*. El GSM es un modelo in silico y estequiométrico que abarca, un gran número de reacciones y vías metabólicas conocidas para una célula vegetal específica. El GSM fue reconstruido, utilizando una matriz estequiométrica, que representaba las relaciones entre los metabolitos sintetizados y consumidos en cada reacción considerada para el modelo. La identificación de los sistemas de vías se realizó, mediante el análisis de información en línea y bases de datos e incluyó 537 metabolitos, 592 reacciones en tres compartimentos (citósol, mitocondria, plásmido). El modelo y las simulaciones se construyeron, utilizando la herramienta de software libre COBRA ejecutada en MATLAB®. Aunque el modelo representó, claramente el flujo de carbono a través del metabolismo central, fue modesto para la comprensión de la distribución del carbono, a través de las reacciones bioquímicas involucradas en el metabolismo secundario de *T. peruviana* (síntesis de glucósidos cardiotónicos y flavonoides) y para el entendimiento a la respuesta metabólica de la célula a las perturbaciones externas. Actualmente, se está trabajando en el refinamiento para lograr un modelo predictivo útil para la comunidad académica involucrada en el campo.

Palabras clave:

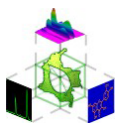
Thevetia peruviana, modelo metabólico, flujo de carbono, flavonoides, glucósidos cardiotónicos.

Agradecimientos/Acknowledgements

Este estudio fue apoyado por el programa de Jóvenes Talento del Ministerio de Ciencia, tecnología. “Convocatoria para el fortalecimiento de proyectos en ejecución de CTel en ciencias de la salud con talento joven e impacto regional” en el marco de la convocatoria 874 de 2020 – Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación de Colombia – COLCIENCIAS.

Referencias/References

- [1]. Arias, M., Angarita, M., Restrepo, J. M., Caicedo, L. A., & Perea, M. (2010). Elicitation with methyl-jasmonate stimulates peruvoside production in cell suspension cultures of *Thevetia peruviana*. *In Vitro Cellular & Developmental Biology. Plant: Journal of the Tissue Culture Association*, 46(3), 233–238. <https://doi.org/10.1007/s11627-009-9249-z>
- [2]. Allen, D. K., Libourel, I. G. L., & Shachar-Hill, Y. (2009). Metabolic flux analysis in plants: coping with complexity. *Plant, Cell & Environment*, 32(9), 1241–1257. <https://doi.org/10.1111/j.1365-3040.2009.01992.x>



Revista Productos Naturales

ISSN 1916-2413



XIV Congreso Colombiano de Fitoquímica

Julio 27, 2022, 5(2):133-135

Disponible en línea en

<https://nozomiscience.org/index.php/rpn/article/view/6889/version/7647>

doi: <https://doi.org/10.3407/rpn.v5i2.6889>



- [3]. Mendoza, D., Arias, J.P., Cuaspud, O., & Arias, M. (2020). Phytochemical screening of callus and cell suspensions cultures of *Thevetia peruviana*. *Brazilian Archives of Biology and Technology*, 63. <https://doi.org/10.1590/1678-4324-2020180735>
- [4]. Poolman, M., Miguet, L., Sweetlove, L., & Fell, D. (2009). A genome-scale metabolic model of *Arabidopsis* and some of its properties. *Plant Physiology*, 151 (3), 1570-1581. <https://doi.org/10.1104/pp.109.141267>