大连化物所发展出基于机器学习的苦味肽筛选新方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/24454.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

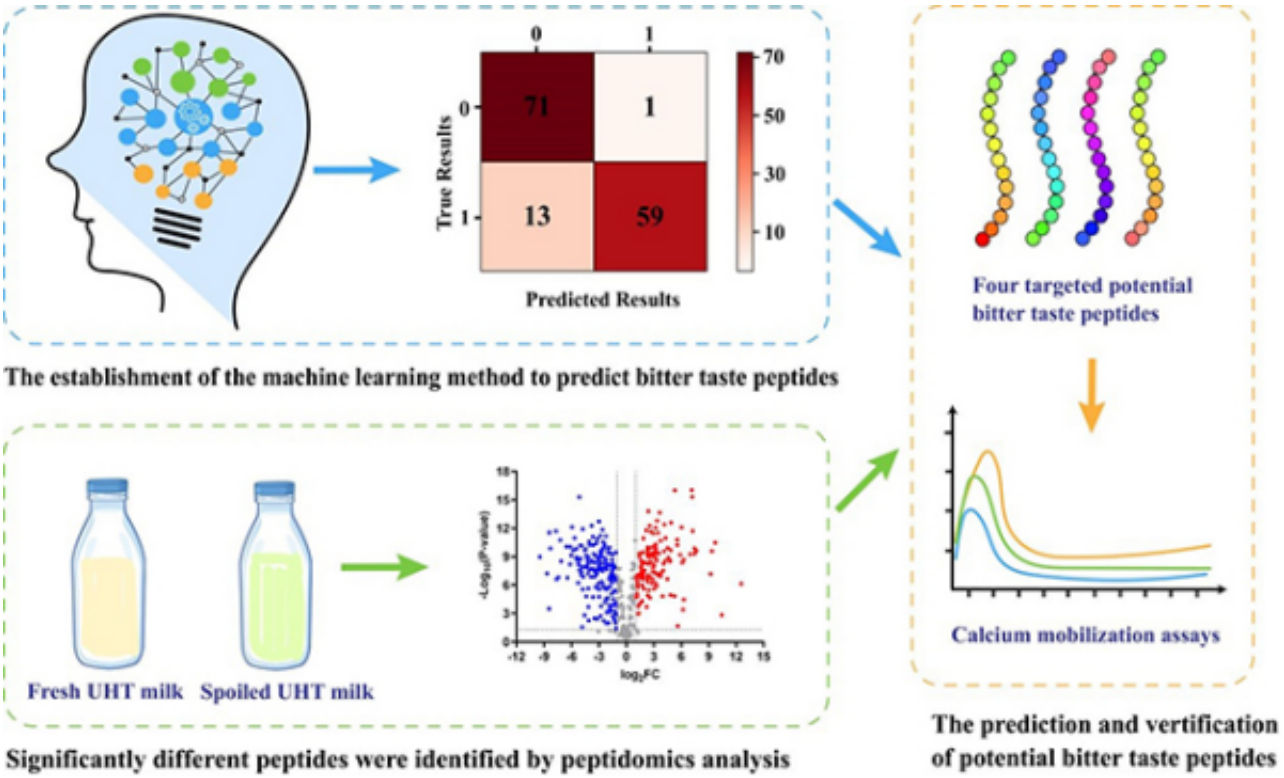
近日，中国科学院大连化学物理研究所能源技术研究平台研究员靳艳团队与大连工业大学、内蒙古伊利实业集团有限公司合作，发展了一种基于机器学习的苦味肽筛选新方法。科研人员利用该方法在超高温处理（Ultra High Temperature
treated，UHT）牛奶中筛选并验证了导致UHT牛奶发苦的苦味肽。

苦味肽是能够与细胞膜上的苦味受体结合进而引发苦味感知的一类小分子肽。UHT牛奶随储存时间的延长会发生变苦的现象，而蛋白质降解产生苦味肽可能是其诱因。除了对风味和营养的影响，苦味肽还被证实具有抗菌、抗炎、抗氧化等生物功能。因此，复杂基质中苦味肽的高通量筛选对营养研究和药物开发具有重要意义。

该团队构建了扩展的基准数据集和全新的特征因子组合，建立了基于轻量梯度提升机（Light Gradient Boosting Machine，LightGBM）算法的苦味肽分类预测模型（Classification Prediction Model for Bitter
Peptide，CPM-BP）。该模型在独立测试集中对苦味肽的预测准确率可达90.3%。利用CPM-BP在变质UHT牛奶中预测到180条潜在苦味肽，其中11条为已被报道的苦味肽。利用HEK293T细胞模型验证CPM-BP预测的3条新结构潜在苦味肽，显示3条潜在苦味肽均可激活HEK293T细胞表达的苦味受体TAS2R4，证实了CPM-BP可有效预测苦味肽。本工作将机器学习与组学技术相结合提出了一套苦味肽鉴定和预测的完整工作流程，揭示了UHT牛奶储存过程变苦的分子机制，为功能肽的筛选提供了新方法。

相关研究成果以*Identification and prediction of milk-derived bitter taste peptides based on peptidomics technology and machine learning method*为题，发表在《食品化学》（*Food Chemistry*）上。研究工作得到国家乳业技术创新中心科研攻关项目的支持。

论文链接



大连化物所发展基于机器学习的苦味肽筛选新方法

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发