
科研人员提出下一代代谢模型构建与使用指南

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25923.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！

科研人员提出下一代代谢模型构建与使用指南。基因组规模代谢模型是系统描述细胞代谢的数学模型，通过计算机建模开展干实验可以指导和部分代替费时费力或无法实现的湿实验，大幅提高研究效率。

目前，研究人员已经构建了数以千计物种的基因组规模代谢模型，这些模型被广泛应用于生物制造和生命健康等领域，特别是在细胞工厂设计和人类疾病研究等方面发挥重要作用。

基因组规模代谢模型的短板在于缺乏细胞生理信息约束，因此研究人员长期致力于在基因组规模代谢模型中整合各类信息，以改善模型。其中，整合酶信息的模型，即酶约束模型，相比于经典的基因组规模代谢模型，具有更好的预测性能和更广阔的应用前景。

然而，整合酶信息需要大量酶参数，而参数匮乏问题阻碍了酶约束模型的普及；另一方面，酶约束模型的构建和使用存在较高门槛，不利于模型的推广应用。

1月18日，中国科学院深圳先进技术研究院陈禹团队与查尔姆斯理工大学团队合作，在《自然-实验手册》发表文章。研究团队发布了用于酶约束模型构建和使用的最新版工具箱——GECKO 3.0，优化了酶约束模型的旧版本并加入了酶参数预测和选择模块，使得构建任意物种的酶约束模型成为了可能。另外，该文章详细描述了酶约束模型构建、模拟和分析的全部流程，能够大幅降低酶约束模型构建和使用门槛。

首先，研究团队介绍了酶约束模型的原理以及GECKO 3.0的新功能，如增加了酶参数预测和选择的模块以及构建轻便版酶约束模型的选项。

研究团队还提出了使用GECKO 3.0的详细教程，包括文件和数据准备阶段，酶约束模型构建阶段以及模型模拟分析阶段，总共涉及79个步骤。此外，文章以酿酒酵母和人类酶约束模型的构建和使用为例对每一步进行了细致讲解。

该文章的预期结果和故障排除部分能够帮助用户进行自查和调试，为酶约束模型的构建和使用提供了便利，进一步促进下一代代谢模型的普及。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41596-023-00931-7>

作者：陈禹等 来源：《自然—实验手册》

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](https://www.iikx.com)转发