科研人员开发出新型代谢工程靶点设计算法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/33882.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！

科研人员开发出新型代谢工程靶点设计算法。
代谢工程作为合成生物学的核心技术手段之一，正成为推动微生物高效生产所需化合物的驱动力。代谢靶点预测是设计-构建-测试-
学习循环的首要环节，决定实验效率与资源投入。细胞内部复杂耦合的酶催化反应和热力学机制共同驱动微生
物代谢行为。基于代谢网络
“ 物理化学本质 ”的细胞机理模型具有AI
模型难以替代的可解释性，正成为提高代谢工程设计精度的关键工具。

传统靶点设计算法如OptForce和FSEOF
依赖化学计
量模型，忽略了酶的资
源消耗与反应的热力学可行性两项关键生理机
制。
中国科学院天津工业生物技术研究所以自然界“ 节能高效 ”的自由能与酶资源的精准协同调控为灵感，提出ET-OptME
框架，将酶约束与热力学约束协同引入代谢靶点设计算法，来提升预测的生理真实性和实验可行性。

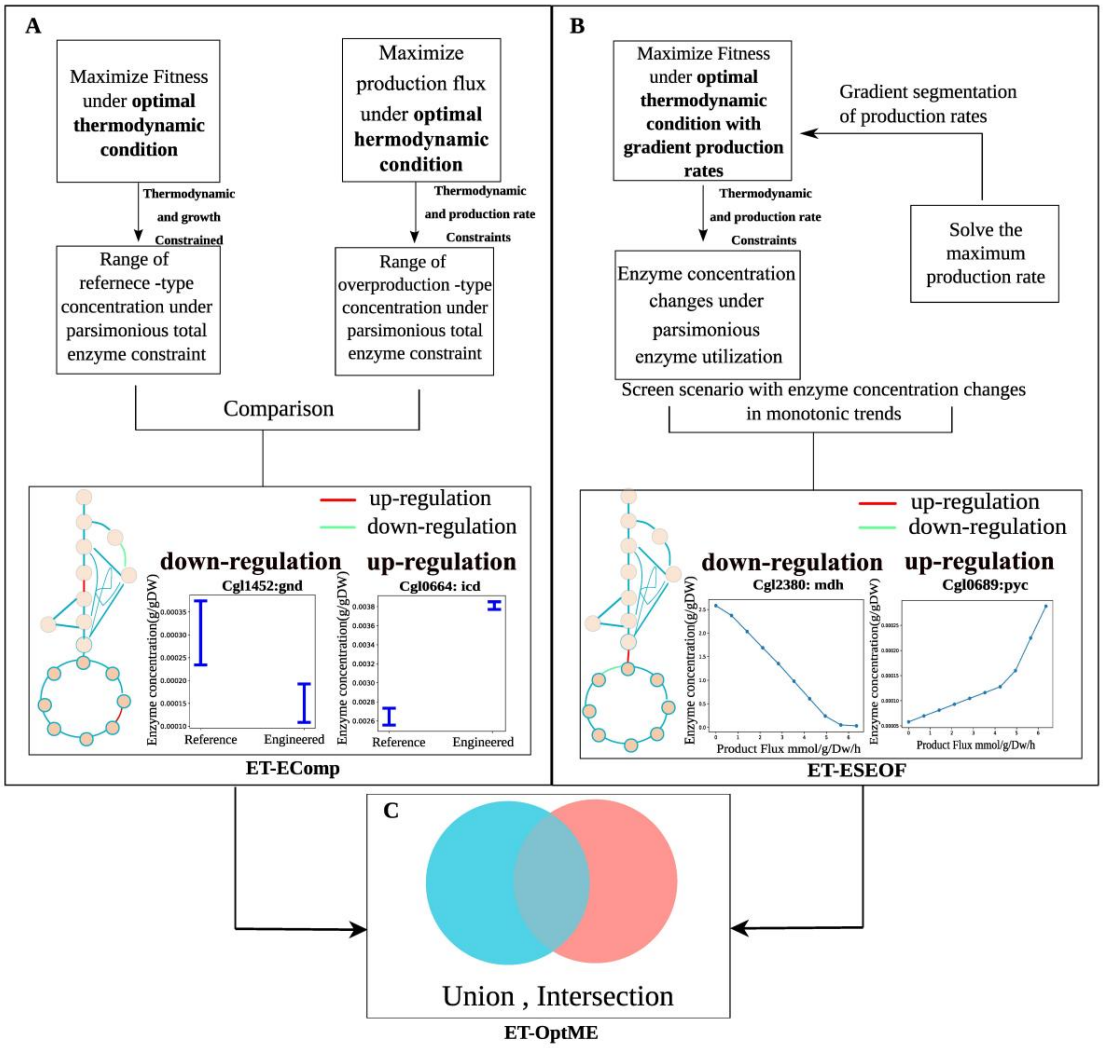
ET-OptME由ET-EComp和ET-
ESEOF两个核心算法组成。ET-EComp
通过比较不同状态下的酶浓度范围来识别上调/下调酶，ET-ESEOF
扫描目标通量增加过程中的酶浓度变化趋势来捕捉调控信号。同时，该框架还引入“ 蛋白中心 ”策略，跳出传统的反应层级靶点预测，解决了预测的多功能酶时可能出现的难以统一调控方向的难题。

在谷氨酸棒状杆菌的5种工业产物案例中，
ET-OptME
在最小精确度指标上比计量学算法提升292%以上，准确度提高106%；
与当前先进的酶约束算法相比，ET-OptME保持70%的精度优势和47%的准确度优势。

进一步，该研究在代谢层面分析了关键靶点如p
yc、gapA与leuA预测成功的原因，展现出酶-
热约束靶点预测算法在提升路径效率和克服代谢瓶颈方面的优势。

相关研究成果在线发表在《代谢工程》（*Metabolic Engineering*）上。研究工作得到国家重点研发计划和国家自然科学基金的支持。

论文链接



ET-OptME的算法示意图

研究团队单位：天津工业生物技术研究所

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