
电子科技大学信息生物学中心邓科君及研究团队文章：芋螺毒素：分类、预测及其在生物信息学中的未来发展方向 MDPI Toxins

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40492.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！

电子科技大学信息生物学中心邓科君及研究团队文章：芋螺毒素：分类、预测及其在生物信息学中的未来发展方向 MDPI Toxins。论文标题：Conotoxins: Classification, Prediction, and Future Directions in Bioinformatics

论文链接：<https://www.mdpi.com/2072-6651/17/2/78>

期刊名：Toxins

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/toxins>

作者简介：

- 第一作者

姓名：李瑞

机构：电子科技大学

研究方向：生物大分子的序列分析与功能预测、机器学习在生物序列分析中的应用

- 通讯作者

姓名：邓科君

机构：电子科技大学

研究方向：药物相互作用研究、中药代谢组学、药用植物次生代谢调控研究、糖尿病生物标志物组学研究

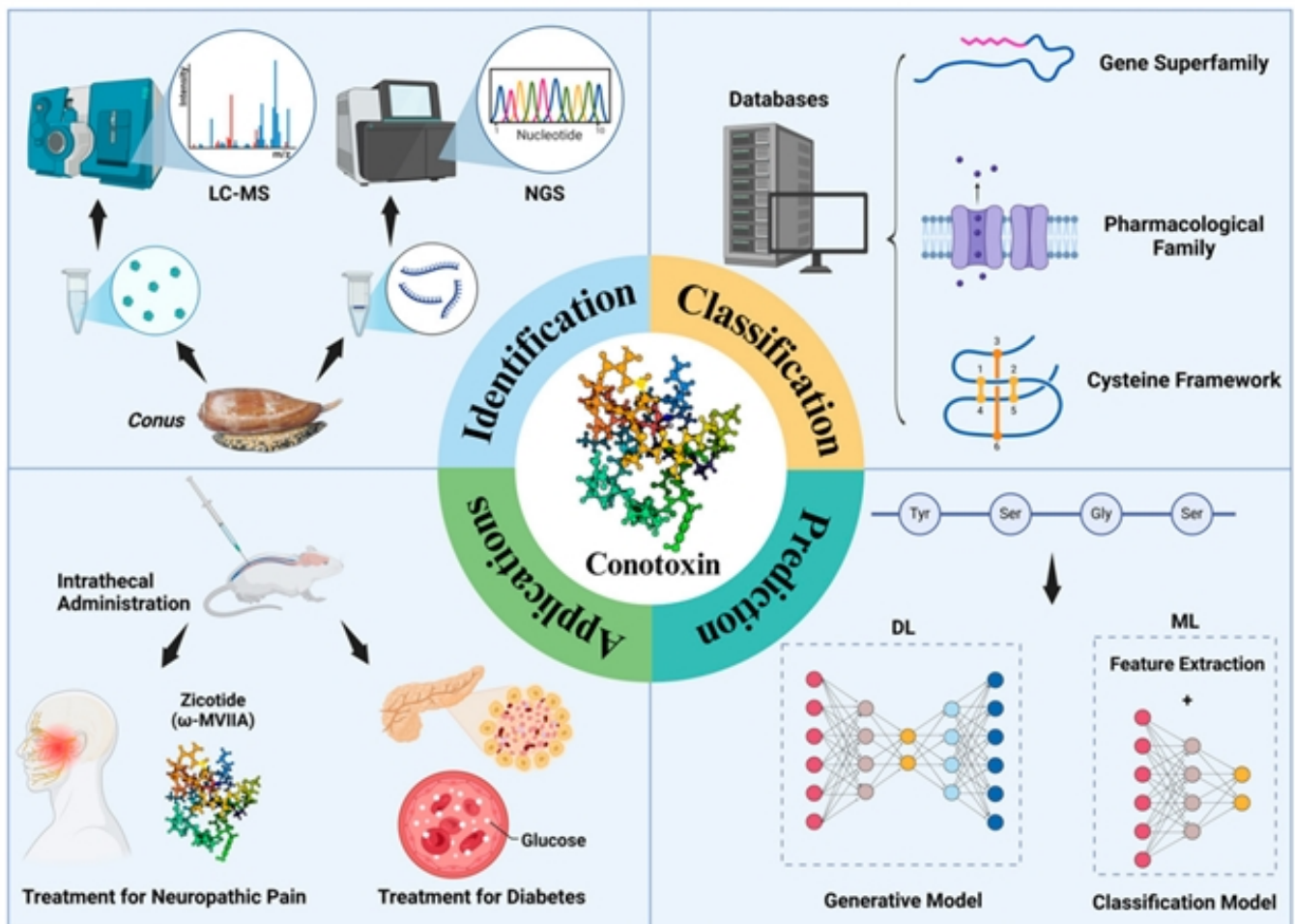
- 作者

姓名：林昊

机构：电子科技大学

研究方向：多组学计算慢性病分析、蛋白质结构与功能的信息分析与预测、基因组功能位点识别、基因调控网络的非线性动力学研究

芋螺毒素（Conotoxin）是一类来源于海洋芋螺（Conus）毒液的富含二硫键小分子多肽，因其能够高选择性作用于离子通道、膜受体及神经递质系统，在神经科学研究和多肽药物开发中备受关注。随着研究不断深入，芋螺毒素已广泛应用于镇痛、神经退行性疾病治疗及代谢性疾病干预等领域。其中，齐考诺肽（Ziconotide，商品名Prialt）是目前唯一获美国FDA批准上市的芋螺毒素类药物，主要用于治疗顽固性重度慢性疼痛。其通过选择性阻断N型电压门控钙离子通道抑制疼痛信号传导，且无阿片类药物常见的成瘾风险，具有重要临床价值。然而，传统毒液提取与生化实验方法效率低、成本高，难以满足大量潜在毒素的快速发现需求。随着高通量测序和生物数据库的发展，基于计算方法的高效研究成为重要方向。来自电子科技大学信息生物学研究中心邓科君教授及其团队在Toxins期刊发表了文章，围绕芋螺毒素的分类、功能预测及智能生成展开系统研究，重点分析了生物信息学方法在毒素发现与药物开发中的应用过程，并提出了数据库优化、多模态信息整合及生成式人工智能应用等未来发展方向。



该综述涵盖内容的示意图（原文图片）

研究过程与结果

本文围绕芋螺毒素的分类、功能预测及智能生成展开系统研究，重点分析了生物信息学方法在毒素发现与药物开发中的应用过程。首先，作者从芋螺毒素的序列特征出发，梳理其成熟肽区域、信号肽区域及翻译后修饰等关键结构特征，并依据半胱氨酸骨架、基因超家族及药理学家族三种主要标准，对芋螺毒素进行了系统分类，为后续功能预测提供理论基础。其次，文章总结了ConoServer、UniProt等核心数据库在序列收集、结构注释和功能标定中的重要作用，构建了机器学习模型所需的高质量数据基础。

在预测方法方面，作者重点分析了ConoDictor 2.0、ConoSorter、ICTCPred、ICTC-RAAC等模型在超家族分类、离子通道靶点识别及毒性预测中的应用效果。研究发现，基于支持向量机（SVM）、随机森林（RF）、Profile Hidden Markov Model（pHMM）及Position-Specific Scoring Matrix（PSSM）的方法，能够显著提升分类精度，其中ConoDictor 2.0对基因超家族的识别准确率接近99%。此外，ConusPipe通过多模型联合策略，在大规模转录组数据中实现了高特异性的新毒素筛选。

Model Feature Quantity Feature Feature Selection Algorithm Publication
Year RBF network 70 DPC Binomial Distribution RBF network 2013 iCTX-Type 50 PseAAC of DP Patterns
F-score, IFS SVM
(RBF Kernel) 2014 ICTCPred 503 Hybrid Features:
CTD, g-Gap DC, PP, SSI SMOTE, Relief, IFS RF 2016 Fscore-SVM 180 PseAAC
(newly added attributes) F-score SVM
(RBF Kernel) 2016 AVC-SVM 68 DPC ANOVA, PCC SVM 2017 ICTC-RAAC 156 NPC
(AAC/DPC/TPC) RAAC, ANOVA, IFS SVM
(RBF Kernel) 2020

离子通道类型靶向预测的不同方法对比（原文表格）

在深度学习方面，ConoDL框架结合Transformer与Wasserstein Autoencoder（WAE），实现了新型芋螺毒素序列的生成与功能筛选。实验结果表明，生成的人工毒素在序列特征和空间结构上与天然毒素高度相似，并具有新的半胱氨酸骨架形式，展现出良好的药物开发潜力。整体来看，机器学习与深度学习技术有效突破了传统实验方法效率低、成本高的限制，为芋螺毒素精准预测和新药研发提供了重要支撑。

研究总结

本文系统综述了芋螺毒素在生物信息学中的分类、预测及生成研究，重点分析了机器学习与深度学习在毒素识别和功能预测中的应用进展。作者指出，传统基于毒液提取、分离纯化及生化实验的方法虽然能够准确验证毒素活性，但存在耗时长、成本高和样本获取困难等问题，难以满足大规模毒素筛选需求。相比之下，结合ConoServer、UniProt等数据库资源，利用机器学习方法进行序列分类、靶点预测和毒性识别，显著提高了研究效率与准确性。尤其是ConoDictor 2.0、ConusPipe及ConoDL等模型，在超家族分类、新毒素发现及序列生成方面展现出较高性能。

本文的主要成果不仅总结了当前芋螺毒素研究中的关键数据库、分类体系及预测模型，还进一步指出了未来研究的重要方向，包括数据库的持续扩展、多模态特征的引入以及深度学习生成框架的优化。作者强调，结构信息、翻译后修饰及碰撞截面等新型特征的融合，将有助于提升模型的

泛化能力和预测精度。

通过上述研究，作者希望推动芋螺毒素从传统实验研究向智能化、生物信息学驱动研究模式转变，加速新型活性多肽的发现与药物开发，特别是在镇痛、糖尿病及神经退行性疾病治疗中的临床转化应用，为海洋来源多肽药物研发开辟了新的研究路径。

期刊介绍

主编：Jay Fox, University of Virginia, USA

期刊主要涵盖了由生物体产生的各类毒素领域的相关研究。

2025 Impact Factor 4.0 2025 CiteScore 8.3 Time to First Decision 19.5 Days Acceptance to Publication 2.8 Days
来源：Toxins

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