

基于 AI 预测的微生物细胞工厂代谢通路智能设计

杨远敬

深圳未名新鹏生物医药有限公司 广东深圳

【摘要】基于 AI 预测的微生物细胞工厂代谢通路智能设计，通过整合多组学数据与机器学习模型，实现代谢流的精准预测与优化，提升目标产物的合成效率。该研究以代谢网络建模为核心，结合深度学习算法对关键节点进行识别与调控策略设计，从而构建高效、稳定的细胞工厂。在实验验证环节，通过对特定代谢通路的改造，显著提高了产物产率与转化效率，验证了 AI 预测在指导代谢工程中的可行性与优越性。本方法不仅为工业生物制造提供了新的智能化设计思路，还为未来的绿色可持续生产奠定了技术基础。

【关键词】AI 预测；微生物细胞工厂；代谢通路设计；多组学数据；代谢工程

【收稿日期】2025 年 8 月 21 日 **【出刊日期】**2025 年 9 月 17 日 **【DOI】**10.12208/j.sdr.20250199

Intelligent design of metabolic pathways in microbial cell factories based on AI prediction

Yuanjing Yang

Shenzhen Sinobioway Xinpeng Biomedicine Co, Ltd, Shenzhen, Guangdong

【Abstract】The intelligent design of metabolic pathways in microbial cell factories based on AI prediction achieves accurate prediction and optimization of metabolic flux by integrating multi-omics data with machine learning models, thereby improving the synthesis efficiency of target products. Centered on metabolic network modeling, this study combines deep learning algorithms to identify key nodes and design regulatory strategies, thus constructing efficient and stable cell factories. In the experimental verification stage, the modification of specific metabolic pathways significantly improved product yield and conversion efficiency, verifying the feasibility and superiority of AI prediction in guiding metabolic engineering. This method not only provides a new intelligent design idea for industrial biomanufacturing but also lays a technical foundation for future green and sustainable production.

【Keywords】AI prediction; Microbial cell factory; Metabolic pathway design; Multi-omics data; Metabolic engineering

引言

人工智能与合成生物学的融合正推动代谢工程进入智能化设计的新阶段。传统的细胞工厂构建往往依赖经验驱动与试错优化，耗时长且效率低。而通过 AI 预测，可以在计算机中对微生物代谢网络进行模拟与分析，精准识别影响目标产物合成的关键基因与酶，从而在实验前制定高效的调控方案。这种方法不仅能减少实验成本，还能显著提高产物产率与稳定性。本文将围绕基于 AI 预测的代谢通路智能设计展开，探讨其在微生物细胞工厂构建中的技术路线、关键方法与实际应用价值，为生物制造领域的创新提供理论支持与实践参考。

1 AI 驱动的代谢通路预测与建模方法

AI 驱动的代谢通路预测与建模方法以系统生物学和计算模拟为核心，将大规模多组学数据与深度学习算法相结合，实现对微生物代谢网络的全局解析。在实际研究中，通过对基因组测序数据、转录组数据、代谢组数据的整合分析，可以构建出精确反映细胞内部物质与能量流转的代谢通路模型^[1]。深度神经网络在建模中发挥关键作用，不仅能够捕捉高维数据中的非线性关系，还能识别潜在的代谢瓶颈与关键酶反应。这种基于 AI 的预测方式能够在计算机环境中模拟外源基因导入、代谢流重定向等操作的效果，大幅缩短实验验证周期，减少设计方案的不确定性，为细胞工厂的精准构建提供坚实的数据支撑。

在代谢通路预测的过程中，AI 模型的训练依赖

大量的历史实验数据与文献资料,这些数据经过特征提取与归一化处理后,被输入到多层神经网络或图卷积网络中,以学习代谢网络的拓扑结构和动力学特性。通过对不同培养条件、底物浓度、基因敲除或过表达等变量的模拟,模型能够输出在特定条件下的代谢流分布预测结果。这种方法相比传统代谢流分析更加灵活和高效,尤其在面对复杂的多分支代谢网络时,能够精准锁定影响目标产物合成效率的关键路径。更重要的是,AI 驱动预测不仅停留在静态网络层面,还能够结合动态建模技术,实现时间尺度上的代谢变化模拟,使得设计方案更贴近真实生产环境。

模型建立完成后,还需要通过多轮迭代优化来提高预测精度。利用强化学习算法,可以在虚拟环境中不断尝试不同的代谢通路改造策略,并根据目标函数反馈优化参数,实现设计方案的自动进化。例如,在目标产物为特定氨基酸的情况下,AI 模型能够自动评估调节合成支路、减少副产物生成以及优化底物利用率等策略的综合效果。通过这种方式,代谢通路的预测与建模不再依赖于人工经验,而是转向数据驱动的智能化设计路径,为微生物细胞工厂的构建奠定了高效率、高准确度的技术基础。

2 微生物细胞工厂代谢网络关键节点识别与优化策略

微生物细胞工厂代谢网络关键节点识别与优化策略的核心目标是提高目标产物的合成效率与细胞整体代谢平衡。在 AI 辅助下,可以通过代谢网络拓扑分析和代谢流分布预测,精准定位控制代谢流方向和速率的关键酶、基因或转运蛋白。关键节点的识别不仅依赖代谢网络的结构特征,还需要结合通量平衡分析(FBA)、同位素标记代谢流分析(^{13}C -MFA)等方法,从全局代谢调控层面判断节点对系统性能的影响。利用这些方法,可以快速找出限制目标产物生成的瓶颈环节,从而为后续的代谢工程改造提供明确的靶点。

在优化策略的制定中,常用的方法包括基因敲除、过表达、异源基因引入以及酶定向进化等^[2]。AI 模型在策略优化中的优势在于能够同时考虑多个调控目标,例如在提高目标产量的降低副产物生成并维持细胞生长速率的稳定性。通过多目标优化算法,AI 能够在数百种可能的改造组合中快速筛选出性能最佳的方案。AI 还能够预测因基因调控带来的代谢网络全局变化,从而避免因局部改造引发的系统不

稳定。对于实际生产而言,这种兼顾产量与稳定性的优化路径具有重要意义。

在实施优化策略时,实验验证与计算预测相辅相成。通过在生物反应器中测试 AI 推荐的改造方案,可以获取真实的代谢流分布和产物生成数据,并将这些数据反向输入模型中进行二次训练,从而不断提升预测的准确性与可靠性。这种循环优化模式能够在较短周期内完成代谢通路的精准调控,实现对关键节点的持续优化。例如,在生产高附加值化学品时,通过逐步调整底物供给速率、优化电子受体利用以及改造能量代谢途径,可以显著提高产物得率并降低原料消耗,实现细胞工厂的经济化与高效化运行。

在微生物细胞工厂代谢网络关键节点识别与优化策略的深入应用中,AI 不仅能够在设计阶段提供精确的改造方向,还能在动态生产过程中实现实时决策支持。通过结合代谢网络动力学模型与机器学习算法,可以在不同发酵阶段监测关键代谢物浓度及流量变化,及时调整代谢通路中关键酶的表达水平,确保代谢流始终朝向目标产物方向聚集。AI 还可利用历史生产数据构建预测模型,提前预判可能出现的代谢失衡或副产物积累问题,并给出前置性优化方案。这种主动干预模式不仅提高了生产过程的稳定性与产率,还显著减少了资源浪费与生产风险,使微生物细胞工厂在复杂工业环境中具备更强的适应性与持续优化能力。

3 智能化代谢通路设计的实验验证与性能提升

智能化代谢通路设计的实验验证与性能提升是将 AI 预测成果落地的重要环节。尽管 AI 能够在计算机中生成高效的代谢网络改造方案,但只有通过实验验证,才能确认其在真实细胞环境中的可行性与稳定性。实验验证通常包括基因操作、代谢通路重构、发酵条件优化等步骤。在基因操作阶段,可以采用 CRISPR/Cas9 系统或 λ -Red 重组技术对目标微生物进行精确的基因编辑,从而实现对关键酶或调控元件的定向修改。随后,在代谢通路重构中,研究人员会引入 AI 预测的调控策略,包括调节启动子强度、优化核糖体结合位点以及引入异源代谢模块等手段,以实现代谢流的定向分配。

性能提升依赖于发酵工艺参数的优化与生产条件的精细控制。在 AI 指导下,可以利用自适应控制算法对发酵温度、pH、溶氧水平以及底物供给速率进行实时调整,使细胞始终处于最优代谢状态^[3-7]。

通过这种动态优化策略,不仅可以最大化目标产物的生成速率,还能延长高产期的持续时间。利用高通量筛选平台,可以同时测试多个不同的改造组合与培养条件,从而快速筛选出性能最优的细胞株。实验数据的积累还可以反哺 AI 模型,使其在后续预测中更加精准,形成数据驱动的自我迭代优化循环。

在性能提升的过程中,稳定性评估同样至关重要。高产细胞株在长时间培养过程中可能出现基因突变或代谢失衡,导致产量下降或细胞死亡。针对这一问题,可以引入基因组稳定化策略,例如整合型基因表达系统、代谢负担分散设计以及对能量代谢的平衡调控等方法。通过结合 AI 预测与实验数据分析,可以提前预判可能出现的不稳定因素,并在设计阶段进行规避。这种从预测到验证再到性能提升的全流程体系,不仅提升了代谢工程的效率与成功率,还为工业规模化应用奠定了坚实基础。

4 AI 赋能的微生物细胞工厂在工业生产中的应用前景

AI 赋能的微生物细胞工厂在工业生产中的应用前景广阔,涵盖生物燃料、医药中间体、食品添加剂、高分子材料等多个领域。通过 AI 预测与设计,代谢通路的优化可以在生产环节实现原料利用率的最大化与副产物生成的最小化,这对于降低成本、提升产品纯度具有显著作用。例如,在生物燃料生产中,AI 可以预测并优化糖代谢与脂质合成通路的耦合关系,从而提高产物的转化效率;在医药领域,通过精准调控关键酶活性,可以显著提升药物前体的合成速率与收率,缩短研发周期。

在工业化放大过程中,AI 技术的引入能够解决从实验室规模到工厂规模的性能衰减问题。传统的放大过程往往需要多轮调整与验证,而 AI 可以通过对发酵动力学参数的大数据分析,提前预测在大规模反应器中可能出现的代谢失衡与生产瓶颈,并给出优化方案^[8]。这种方法不仅减少了试错成本,还能够生产初期就达到接近实验室条件下的产量与纯度。结合工业物联网与传感器技术,AI 能够实现生产过程的实时监控与预测性维护,确保细胞工厂在长期运行中的稳定性与高效性。

未来,AI 赋能的微生物细胞工厂有望与绿色制造、碳循环利用等战略目标深度融合,实现环境友好型生产模式。通过将 AI 预测与可再生资源利用相结合,可以在减少化石能源依赖的开发出以生物质

为原料的高附加值产品。AI 的持续进化将进一步提升代谢通路设计的精度与灵活性,使细胞工厂能够快速适应市场需求变化并实现个性化生产。这一趋势不仅将推动生物制造业的转型升级,也将在全球可持续发展战略中发挥重要作用。

5 结语

本研究围绕基于 AI 预测的微生物细胞工厂代谢通路智能设计展开,从代谢通路建模、关键节点识别、实验验证到工业化应用进行了系统探讨。AI 技术的引入显著提升了设计的精准性与效率,使代谢工程从经验驱动转向数据驱动与智能优化。通过计算预测与实验迭代的结合,不仅优化了产物产率与稳定性,还为绿色制造与可持续发展提供了可行路径。该方法为未来生物制造的创新和产业升级奠定了坚实基础。

参考文献

- [1] 刘光耀. 基于微生物组学、代谢组学与 fMRI 的肠易激综合征发病机制研究[D]. 甘肃:兰州大学,2022.
- [2] 中国人民解放军总医院. 一种基于多组学数据利用 AI 模型预测体适能表型的方法及其装置: CN202310275284.4[P]. 2023-07-11.
- [3] 赵晨阳. 基于肠道菌群探究龙眼肉及其有效部位抗阿尔茨海默病的作用机制[D]. 辽宁:辽宁中医药大学, 2024.
- [4] 胡海涛,吕小妹. 微生物细胞工厂合成植物类黄酮:关键酶挖掘及异源生物合成[J]. 食品科学,2025,46(13):1-17.
- [5] 朱欣娜,戴住波,樊飞宇,等. 微生物细胞工厂[J]. 科学通报,2023,68(13):1626-1636.
- [6] 高聪,郭亮,胡贵鹏,等. 微生物细胞工厂碳流调控进展[J]. 化工进展,2021,40(12):6807-6817.
- [7] 张震,曾雪城,秦磊,等. 微生物细胞工厂的智能设计进展[J]. 化工学报,2021,72(12):6093-6108.
- [8] 孙天丽,黄明珠,刘斌,等. 基于合成生物学微生物底盘细胞构建与优化的研究进展[J]. 食品工业科技,2025,46(1): 394-402.

版权声明: ©2025 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS