

Compléments à l'article « La conception rationnelle de ferments biologiques : comment concevoir un micro-organisme pour produire un composé chimique spécifique », Cyrille Pauthenier, Pablo Carbonell et Jean-Loup Faulon (*L'Act. Chim.*, 2013, 375-376, p. 30)

Outils de conception automatique pour l'ingénierie métabolique

Nom	Description	Réf.
Prédiction automatique et aide à la conception de voies métaboliques		
BNICE	Identification et estimation thermodynamique de voies métaboliques.	[28]
Cho <i>et coll.</i>	Identification et classement des voies métaboliques pour un produit spécifique.	[29]
DESHARKY	Identification des voies métaboliques et de leur compatibilité avec l'organisme hôte. Utilisation d'un système de propagation d'annotation basé sur la séquence en acides aminés.	[32]
Retropath	Identification et classement des voies métaboliques pour un produit spécifique. Identification des protéines candidates sur la base d'apprentissage machine.	[30]
FMM	Identification des voies métaboliques entre un composé et un autre dans KEGG.	[26]
Metabolic tinker	Identification des voies métaboliques entre deux composés.	[27]
CarbonSearch	Identification des voies métaboliques en utilisant le marquage isotopique.	[33]
OptStrain	Proposition des délétions de gènes pour optimiser une voie métabolique dans un organisme hôte.	[34]
Outils de cartographie et d'analyse de métabolites		
MetaCyc	Base de données métaboliques.	[4]
KEGG	Base de données métaboliques de tous les organismes confondus. Contient de nombreuses informations sur les enzymes et une propagation des annotations sur la base de l'orthologie.	[3]
IMG	Base de données intégrée pour l'analyse comparative et évolutive des génomes microbiens.	[35]
Outils d'analyse de flux		
COBRA ToolBox	Un des premiers programmes de FBA basé sur matlab.	[16]
MetaTool	Outil de décomposition des cartes métaboliques en voies ou modes élémentaires.	[18]
OptFlux	Outil d'analyse de flux simple à utiliser avec interface graphique.	[19]
SurreyFBA	Outil d'analyse de flux avec interface graphique et une carte pour la visualisation des flux.	[36]
CycSim	Serveur web pour calculer les flux pour des souches naturelles et délétions.	[20]
BioMet toolbox	Serveur web pour un certain nombre d'analyses de flux, délétions et traçages isotopiques.	[37]
COPASI		[38]
Propagation d'annotation		
Promis	Identification d'enzymes capables de catalyser une réaction donnée sur la base d'un apprentissage machine des séquences et de règles de réaction.	[7,8]
antiSMASH	Identification, comparaison et annotation de clusters de gènes synthétisant des métabolites secondaires.	[39]
BLAST	Outil de comparaison de séquences sur une base de données de génomes séquences.	[40]
Treebase	Base de données d'arbres phylogénétiques.	[41]
Toxicité		
EcoliTox	Prédiction de la toxicité d'un composé chimique pour <i>E. coli</i> sur la base d'un apprentissage machine de données expérimentales de toxicité.	[31]

Références

[1] à [31] : voir l'article.

- [32] Rodrigo G., Carrera J., Prather K.J., Jaramillo A., DESHARKY: automatic design of metabolic pathways for optimal cell growth, *Bioinformatics*, **2008**, 24(21), p. 2554.
- [33] Heath A.P., Bennett G.N., Kavraki L.E., Finding metabolic pathways using atom tracking, *Bioinformatics*, **2010**, 26(12), p. 1548.

- [34] Pharkya P., Burgard A.P., Maranas C.D., OptStrain: A computational framework for redesign of microbial production systems, *Genome Research*, **2004**, *14*(11), p. 2367.
- [35] Markowitz V.M., Chen I.-M.A., Palaniappan K., Chu K., Szeto E., Grechkin Y., Ratner A., Jacob B., Huang J., Williams P., Huntemann M., Anderson I., Mavromatis K., Ivanova N.N., Kyrpides N.C., IMG: the integrated microbial genomes database and comparative analysis system, *Nucleic Acids Research*, **2012**, *40*, p. D115.
- [36] Gevorgyan A., Bushell M.E., Avignone-Rossa C., Kierzek A.M., SurreyFBA: a command line tool and graphics user interface for constraint-based modeling of genome-scale metabolic reaction networks, *Bioinformatics*, **2011**, *27*(3), p. 433.
- [37] Cvijovic M., Olivares-Hernández R., Agren R., Dahr N., Vongsangnak W., Nookaew I., Patil K.R., Nielsen J., BioMet Toolbox: genome-wide analysis of metabolism, *Nucleic acids research*, **2010**, *38*, p. W144.
- [38] Hoops S., Sahle S., Gauges R., Lee C., Pahle J., Simus N., Singhal M., Xu L., Mendes P., Kummer U., COPASI-a COmplex PAtHway Simulator, *Bioinformatics*, **2006**, *22*(24), p. 3067.
- [39] Medema M.H., Blin K., Cimermancic P., de Jager V., Zakrzewski P., Fischbach M.A., Weber T., Takano E., Breitling R., antiSMASH: rapid identification, annotation and analysis of secondary metabolite biosynthesis gene clusters in bacterial and fungal genome sequences, *Nucleic Acids Research*, **2011**, *39*, p. W339.
- [40] Camacho C., Coulouris G., Avagyan V., Ma N., Papadopoulos J., Bealer K., Madden T.L., BLAST+: architecture and applications, *BMC bioinformatics*, **2009**, *10*, p. 421.
- [41] Wang J.T., Shan H., Shasha D., Piel W.H., Fast structural search in phylogenetic databases, *Evolutionary bioinformatics online*, **2005**, *1*, p. 37.