

D-CyPre

(Vesion 1.0)

用
户
手
册

前 言

感谢您选择使用 D-CyPre (Directed message passing for Cytochrome P450 metabolic site Prediction) 工具。作为一款用于预测代谢物经 CYP450 代谢时的代谢位点的软件, D-CyPre 针对 9 种最重要的人类 CYP450 亚型(CYP1A2、CYP2A6、CYP2B6、CYP2C8、CYP2C9、CYP2C19、CYP2D6、CYP2E1、CYP3A4) 进行分析。本工具将定向消息传递图神经网络与 XGBOOST 结合, 以提供高精确率的预测结果。本软件支持以下 9 种 I 相代谢反应的预测: 氧化、断裂、环氧化、还原、羟基化、硫氧化、氮氧化、磷氧化和环化。

1. 代谢位点预测

用户在使用时仅需输入一个包含待预测分子名称及 SMILES 的 Excel 文件即可。导入完毕后用户仅需选择本次计算所采用的计算模式（高精确率模式和高召回率模式），然后工具将自动完成预测并输出可视化的预测结果。在可视化结果中（图 1），键或原子的红色越深表示该位置属于代谢位点的概率越高，具体概率值将标记在原子旁边。需要注意的是，由于只有概率大于 50% 的位置是潜在的代谢位点，因此 D-CyPre 仅显示预测概率大于 50% 的结果。

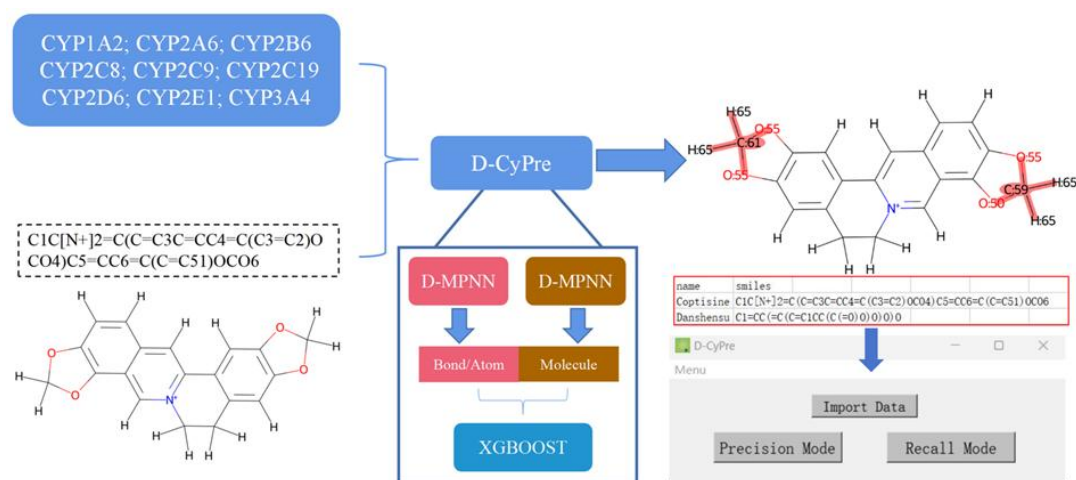


图 1 代谢位点预测

2. 代谢产物预测

预测代谢位点的目的是预测化合物的代谢产物，基于预测的代谢位点，用户可进一步推测化合物的代谢产物，推理规则具体如下：

- ① 代谢位点为原子：若该原子是 S、N 或 P，则该位置发生氧化；当原子是芳香 C 且与 H 相连时，则该 C 原子发生羟基化；如果是脂肪 C 并且与 N 或 O 原子相连时，则所有与 N 和 O 原子连接的键都会断裂。并且，如果分子断裂后生成两种产物，则认为产物中的脂肪 C 会进一步氧化。
- ② 代谢位点为键：若键是 C-H 且该 C 原子还与 O 或 N 原子相连，则按 C 原子为代谢位点进行分析；若该 C 原子并未与 O 或 N 原子连接则该 C 原子被羟基化；若键两端的原子都是 C 原子且该键是双键，则将发生环氧化；若该键是 C-O，则该 C 原子发生氧化；若是该键是 i-O，并且 i 是 S、N 或 P，则 i-O 断裂；如果有多个 O 与 i 相连，并且 i 是 S 或 P，则其中一个 i-O 断裂；如果有多个 O 与 i 相连且 i 是 N，则将还原为伯胺基。如果环中的所有键都是代谢位点，则发生芳香环和非芳香环的互变。