

IN SILICOソリューションにより 抗体医薬品の創薬において 効率および安全性の向上を推進 使用事例



課題：

従来の方法では、新薬候補の二重特異性抗体を最適化し、免疫原性を低減するために、多大な時間とリソースが必要となることがわかっていました。

ソリューション：

本企業は、候補抗体の最適化と免疫原性の低減のための*in silico*モデリング・シミュレーションとして、BIOVIA Biotherapeutics Designソリューションを採用しました。

成果：

候補抗体の品質の向上、後期段階での失敗の減少、開発スケジュールの加速化とともに、大幅なリソースの削減を実現することができました。

クライアント

バイオ医薬品のグローバルなイノベーター

臨床開発を行う中国の本バイオテクノロジー企業は、免疫系を利用した革新的な抗体医薬品により、がんの治療転帰の向上に力を尽くしています。

腫瘍領域を専門とする本企業は、研究・開発のスピードを速め、より早く次世代の抗体医薬品を届けるために、業界をリードするグローバルなバイオ医薬品企業と提携しています。

本企業は、抗体医薬品の開発に関する専門知識と先進的なテクノロジーを利用し、がん治療の飛躍的な進歩を推進しています。ひたむきに取り組む研究者チームにより、本企業は常にイノベーションの先頭に立ち、がん患者のために治療成果を向上させ続けています。

課題

抗体医薬品の創薬におけるボトルネックを解消すること

本企業は、腫瘍細胞を標的として破壊する二重特異性免疫細胞誘導抗体を開発しています。しかし、当該候補抗体の最適化・検証には、大きな障害がありました。従来のスクリーニング手法では、多大な人手とリソースを要し、長期に及ぶスケジュールが必要となります。また、ヒト化の手順による免疫原性の低減は、さらなる複雑化をもたらし、開発の遅延とコストの上昇を招いていました。

これらの障害に対処するために、本企業は、コンピュータによるモデリング・シミュレーションを活用して、最適な有効性と安全性を備えた高品質な候補抗体を特定する、高度な*in silico*ソリューションを必要としていました。具体的には、以下を行うことができるプラットフォームを求めています：

- ・ 結合相互作用を予測すること
- ・ 抗体変異体を最適化すること
- ・ 開発の初期段階で免疫原性のリスクを評価すること

本企業は、このようなソリューションを採用することにより、自社の創薬を効率化し、候補抗体の品質を改善し、スケジュールを加速させると同時に、コストを削減することを目指しました。

ソリューション

BIOVIA BIOTHERAPEUTICS DESIGNソリューションによる*IN SILICO*モデリング・シミュレーション

BIOVIAの包括的なBiotherapeutics Designソリューションは、研究者が創薬のワークフローのスピードを速め、上市までの期間を短縮できるように支援します。これらのソリューションは、規制要件、事業上の要請や市場の要望に応じながら、最適なバイオ医薬品候補物質を特定します。

BIOVIAのプラットフォームにより、計算構造生物学者は、抗体をベースとした医薬品を設計するための強力な信頼できるワークフローに沿って作業することができます。そのメリットとして、以下が挙げられます：

- ・ ZDOCKによるタンパク質-タンパク質ドッキングを実施
- ・ タンパク質の構造の柔軟性をシミュレートし、分子間相互作用を解析
- ・ 凝集、粘度、溶解性や開発可能性等の製剤特性を予測
- ・ ヒト化を行って免疫原性を低減し、安全性プロファイルを向上

3DEXPERIENCE®クラウドで稼動するBIOVIAのソリューションは、複雑なモデリングやシミュレーションのために、スケーラブルで高性能な演算処理を提供します。また、研究者は、バーチャル環境で設計したデザインを登録し、実験の詳細を記録して、ワークフローをシームレスに統合することができます。

成果

*IN SILICO*技術によるイノベーションで生物学的製剤の創薬を推進

本企業では、BIOVIAの創薬プラットフォームの採用以降、免疫細胞と腫瘍細胞を標的とする二重特異性抗体の設計ワークフローを効率化しました。

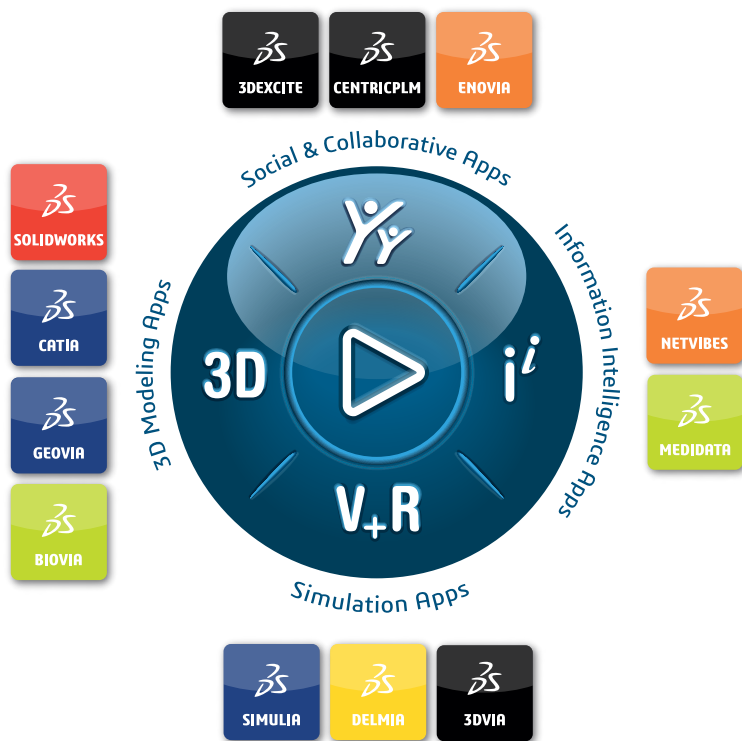
主な成果として、以下が挙げられます：

- ・ **効率の向上**：*in silico*での設計作業により、実試験が減り、時間やリソースが削減されました。
- ・ **Improved Safety**：安全性の向上：免疫原性のリスクを早期に特定することにより、有効性を損なうことなく、二重特異性抗体の安全性を向上させることができました。
- ・ **スケジュールの加速化**：バーチャル環境での予測により、低品質の候補抗体を早期に特定できるため、後期段階での失敗が減り、開発可能性が向上しました。

本企業は、早期の段階で候補抗体の最適化に関する課題に対処することにより、より迅速かつ効率的に次世代のバイオ医薬品を届け、がん患者のために治療成果の向上を実現しています。

「BIOVIA Biotherapeutics Designの一連の製品を利用することにより、ほぼ予測通りの結果が、迅速かつ容易に得られています。このため、実験で作製・検証する必要があるサンプルの数が減少し、時間とコストの両方が削減されました。結果として、患者さんのために、より良い成果を挙げ、より有効性の高い抗体を手に入れています。」

— 臨床開発を行うバイオテクノロジー企業の研究・開発部長



Our **3DEXPERIENCE**® platform powers our brand applications, serving 12 industries, and provides a rich portfolio of industry solution experiences.

Dassault Systèmes, the **3DEXPERIENCE** Company, is a catalyst for human progress. We provide business and people with collaborative virtual environments to imagine sustainable innovations. By creating virtual twin experiences of the real world with our **3DEXPERIENCE** platform and applications, our customers can redefine the creation, production and life-cycle-management processes of their offer and thus have a meaningful impact to make the world more sustainable. The beauty of the Experience Economy is that it is a human-centered economy for the benefit of all –consumers, patients and citizens.

Dassault Systèmes brings value to more than 300,000 customers of all sizes, in all industries, in more than 150 countries. For more information, visit www.3ds.com.

Europe/Middle East/Africa

Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay Cedex
France

Asia-Pacific

Dassault Systèmes K.K.
ThinkPark Tower
2-1-1 Osaki, Shinagawa-ku,
Tokyo 141-6020
Japan

Americas

Dassault Systèmes
175 Wyman Street
Waltham, Massachusetts
02451-1223
USA

DASSAULT SYSTEMES | The **3DEXPERIENCE**® Company