

从靶点到候选药物：

计算机模拟加速并优化生物药发现



© 2025 达索系统版权所有。保留所有权利。3DEXPERIENCE、Compass图标和 3DS标志、CATIA、SOLIDWORKS、ENOVIA、DELMIA、SIMULIA、GEOVIA、EXALEAD、3DVIA、BIOVIA和NETVIBES均为达索系统或其子公司在美国和/或其他国家的商业商标或注册商标。其他所有商标均归其各自所有者。使用达索系统或其子公司的任何商标均需获得其明确的书面批准。



引言： 从经验判断迈向AI赋能，加速生物药发现进程

生物药的发现过程历来漫长而复杂，高度依赖反复试错，导致成本居高不下且成功率偏低。长期以来，制药研发主要依靠经验判断、偶然发现以及耗时繁杂的实验室工作来识别、测试乃至优化候选药物。然而，随着行业向新型疗法和个性化医疗转型，生物制药领域面临诸多新挑战，包括加快研发进度、降低失败风险以及应对生物制药生产的复杂性等行业需求。

本电子书将深入剖析实验室数字化和人工智能（AI）赋能的计算机模拟技术如何重塑药物开发流程，助力生物制药企业缩短上市周期、提升候选药物质量、优化生物过程开发，并确保符合监管标准。BIOVIA凭借前沿技术，提供了一套全面的应用解决方案，助力研发人员设计和开发高质量生物药，从而在突破性疗法的研发竞争中抢占先机。



目录

生物药发现的复杂性	3
从靶点到候选药物： 更智能的药物发现策略	4
第一步： 构建疾病相关的生物靶点模型	5
第二步： 减少湿实验和研发测试循环次数	6
第三步： 开发并优化生物过程，确保生物治疗药物疗效的安全性及疗效	7
第四步： 提高候选药物的安全性指标	8
计算机建模与仿真技术的影响	9

生物药发现的复杂性

药物发现常被比喻为“大海捞针”——研究人员需要从数以百万计的潜在治疗分子中筛选出极少数能与靶点结合的候选药物。尽管如此，这些候选药物中绝大多数仍无法达到预期的临床治疗效果，这使得药物发现成为一个高成本、长周期、高风险的过程。

核心挑战

1. 识别并验证合适的靶点

靶点识别是药物发现的基础，但这一过程依赖多步累进的尝试。研究人员需要进行精准的实验以确保相关性，这一阶段的每一步的失误都会将最终结论引入歧途。

2. 筛选和优化候选治疗药物

生物药（例如抗体、肽类）必须经过严格的测试以验证其疗效、安全性和可生产性。为满足严格的监管标准，通常需要经历多轮筛选与优化，这进一步加剧了生物药发现的复杂性和耗时性。

3. 建立规模可扩展的生产过程

即使找到具有治疗前景的候选药物，确保其在大规模生产中的稳定性和可扩展性仍然是一项重大挑战。生物药的生产工艺极为复杂，需要精细的制造过程来确保产品的质量和效率。

“尽早失败”策略加速成功

在生物药发现中，“尽早失败”策略至关重要。分子建模以及人工智能和机器学习技术能够帮助研究人员在早期阶段淘汰潜力不高的候选药物，从而避免后续昂贵的实验室测试和临床试验投入。这一策略促使研发团队集中资源，专注于最具前景的候选药物，进而节省时间、降低成本，并提升研发成功率。

分子建模和人工智能/机器学习的优势

BIOVIA的生物治疗药物设计解决方案能够有效应对上述挑战，减少对大规模实验的依赖，并帮助研究人员实现：

- **更早预测结果：**优先考虑高治疗潜力的候选药物。
- **优化研发流程：**减少浪费，加快研发进度。
- **降低研发成本：**集中资源于高质量候选药物。



数据透视：药物发现面临的挑战

20亿美元¹

单个药物从发现到上市的平均成本

10年以上¹

药物发现与开发的常规周期

临床试验通过率仅10%²

近年来，候选药物的临床试验成功率持续降低。

数据来源：

¹ DiMasi, 2014; DiMasi et al., 2016

² 《2011–2020年临床开发成功率及影响因素》

从靶点到候选药物： 更智能的药物发现策略

新型生物治疗候选药物的发现不仅要求精度高、速度快，还需符合监管要求、商业战略定位及市场预期。BIOVIA解决方案通过整合行业领先的分子建模与仿真技术以及人工智能和机器学习战略，将彻底革新药物发现过程。

研究人员可借助计算机模拟技术深入洞察分子行为，精准预测实验结果，高效识别并优化候选药物，从而减少对昂贵且耗时的实验的依赖。

BIOVIA将“质量源于设计”（Quality by Design）理念融入药物发现的每一阶段，在加速研发进程的同时，确保候选药物达到临床和市场成功的最高标准。

这一策略的核心是准确预测并优化生物治疗药物的关键特性，包括：

- **亲和力：**候选药物与靶点结合能力如何？
- **疗效：**候选药物能否实现预期治疗效果？
- **安全性：**候选药物是否存在毒性或不良反应风险？
- **可扩展性：**相关生物过程能否支持大规模稳定生产？

通过及早优化这些关键要素，研究人员得以聚焦最具潜力的候选药物，从而降低后期失败风险，优化生物工艺开发，加速新药上市进程。

生物治疗药物的发现路径



这一系列步骤构成了一条高效的生物治疗药物发现路径，助力研究人员更加快速、高效地推出创新疗法，为研发成功注入强大信心。



第一步：

构建疾病相关的生物靶点模型

生物药发现的第一步是构建疾病相关的生物靶点模型。这一环节至关重要，因为它直接关系到后续治疗靶点的选择。然而，传统的靶点识别方法高度依赖繁复的实验，耗时费力。

BIOVIA Biotherapeutics Design系列解决方案通过计算机建模与仿真技术，极大地优化了这一过程，帮助研究人员减少不必要的湿实验环节，使他们专注于高潜力的药物靶点。

BIOVIA的计算机建模方法如何助力靶点识别

- 构建生物靶点的3D精细模型，高效识别可成药结合位点。
- 分析基因和蛋白序列。
- 模拟分子动力学和蛋白翻译后突变，评估其对靶点结构、行为及功能的影响。

这一方法可大幅加速药物靶点识别，提高生物药发现效率，节省大量时间与资源。

计算机靶点建模的关键优势

3D蛋白质建模，提供精准的结构和功能洞察。

开展虚拟实验，优先开发可成药靶点。

基因和蛋白序列分析，识别全新靶点。

核心技术解决方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Pipeline Pilot



第二步：

减少湿实验和研发测试循环次数

生物药发现的第二步着重于减少“设计-合成-测试”循环的次数。B利用BIOVIA Biotherapeutics Design系列解决方案，研究人员可以采用计算机模拟方法对潜在的候选药物进行虚拟评估，从而减少对传统实验的依赖，提高药物发现效率。

BIOVIA计算机建模与仿真技术如何优化候选药物测试

- 利用同源建模或基于AI技术生成目标蛋白的3D结构，为蛋白-蛋白对接提供稳健可靠的起始模型。
- 结合人工智能和基于物理的建模技术，预测并优化候选药物的靶点亲和力、疗效和安全性。
- 进行分子动力学模拟，深入分析分子行为，探索药物作用机制。
- 支持研发先进的生物药形式（如双特异性抗体、单链可变区片段、抗体-药物偶联物等），助力研究人员识别最具潜力的候选药物。

通过减少低潜力候选药物的测试循环次数，研究人员得以将资源集中在更具发展前景的药物上，从而优化研发流程，提升整体成功率。

计算机靶点建模的关键优势

快速评估多种候选治疗药物，最大程度降低实验室试错成本。

早期预测药物关键特性，优化候选药物选择。

利用先进的分子建模和人工智能技术，提升生物治疗药物质量。

核心技术解决方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration



第三步：

开发并优化生物过程，确保生物治疗药物的安全性与疗效

生物药发现的第三步着重于利用计算机模拟技术优化候选治疗药物，确保其在规模化生产中保持生物学特性的完整性和规模可扩展性。

利用BIOVIA Biologics Process Development系列解决方案，研究人员可以将实验室数据数字化，有效应对生物工艺开发中的挑战，从而高效产出既安全有效又符合质量和产量要求的治疗药物。

BIOVIA实验室信息学解决方案如何重塑生物过程开发

- 在上下游生物过程开发中，设计、记录并优化细胞株、细胞培养基以及其他过程参数。
- 利用既往工作积累，例如类似细胞株和过程条件的数据，避免从零开始。
- 利用实验设计（design-of-experiments）和预测建模（predictive modeling）等工具，在开发初期及早识别并规避潜在的开发难题。
- 结合亲和力和、疗效和安全性预测与生物工艺开发的产量数据，精细化生产策略。

这一方法通过融合既往经验积累和计算模型优势简化生物过程开发，为建立稳定可扩展的生产过程节约了宝贵的时间资源。

生物过程优化的关键优势

利用虚拟技术优化生物过程参数，最大程度减少试错环节。

充分利用经验证的知识，提高生产效率，降低风险。

将生物过程开发与企业目标相结合，重点关注可扩展性和可持续性。

核心技术解决方案：

BIOVIA ONE Lab

流程执行

样品管理

设备管理

库存和材料管理

电子实验记录（ELN）



第四步：

提高候选药物的安全性指标

生物药发现的最后一步着重于改善候选药物的制剂特性和安全性。一旦识别出成功潜力高和可扩展性的分子，研究人员即可利用计算机模拟技术优化这些候选药物。

利用BIOVIA Biotherapeutics Design系列解决方案，研究人员可以改善候选药物的安全性及制剂特性。

BIOVIA的计算机建模与仿真技术如何确保候选药物的安全性和稳定性

- 预测潜在的免疫原性问题，通过抗体人源化策略开发安全的治疗方案，从而规避代价高昂的I期临床试验失败风险。
- 评估溶解度、粘度和聚集倾向等生物物理性质，及早应对稳定性挑战。
- 通过虚拟测试优化候选药物，允许进行修饰或采用独特制剂方案，提升药物的安全性和稳定性。

这一方法可以最大程度地减少药物开发后期的意外事件，降低调整成本，确保生物药在临床上成功应用，同时保障患者安全。

先导化合物优化的关键要点

采用有文献支持的抗体人源化方案，有效降低药物免疫原性。

识别溶解度和聚集特性等稳定性挑战，提高临床开发的成功率。

优化制剂特性，以支持灵活的生产和药物递送方式，并延长储存和保质期。

核心技术解决方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration

计算机建模与仿真技术的影响

BIOVIA的计算机建模与仿真解决方案套组融合了人工智能和机器学习模型，极大地加速了药物发现进程。结合BIOVIA强大的工艺开发功能，这些解决方案将助力生物制药企业在确保药物质量和可扩展性的前提下，快速推进生物药的发现与开发。

从靶点识别到候选药物开发，BIOVIA全面支持并优化药物发现与开发流程的每一个环节，在生物新药研发的激烈角逐中，赋予研究人员极大的竞争优势。

关键优势

- 加速靶点识别：快速识别生物学相关靶点，聚焦最具开发潜力的候选药物。
- 加强目标药物靶点亲和力：识别具有高亲和力的候选分子，改善药物治疗效果。
- 改善生物学活性：开发具有更高临床成功潜力的生物治疗药物。
- 优化安全性指标：早期识别并解决免疫原性等安全性问题，减少后期风险。
- 提高生物过程产量：优化可扩展性和稳定性，满足高效生产需求。

如何助力生物药发现

扩大药物发现范围

仅需短短**数小时**，即可对数千种分子进行虚拟筛选

提高成功率

虚拟设计的抗体候选分子的成功率高达**75%至80%**

提升准确性

高达**90%**的候选分子在靶点相互作用方面有所改进

节省时间

早期发现阶段用时缩短最多可达**60%**

节省成本

早期研发成本节省**40%至60%**

数据来源：BIOVIA内部分析



从靶点到候选药物

在过去二十年间，制药行业迎来了前所未有的创新高潮。生命科学领域的领军企业正与BIOVIA（达索系统旗下知名品牌）携手合作，共同加速药物发现与开发进程。BIOVIA提供全面的分子建模与仿真解决方案套组——Discovery Studio，能够覆盖从靶点识别到先导化合物优化的整个药物发现流程。

该解决方案配备了一系列功能强大的工具，助力计算化学家和计算结构生物学家设计出稳定且优质的新型生物治疗药物。

随着药物从发现阶段逐步迈向开发、临床生产和商业化运营，数据可追溯性在每个阶段都扮演着至关重要的角色。为此，BIOVIA ONE Lab解决方案为生物制药企业开发新型生物治疗药物的所有科学流程和步骤提供全面支持。

如需了解更多信息，敬请访问：www.3ds.com/products/biovia/biotherapeutics-design-and-optimization.



我们的 **3DEXPERIENCE®** 平台能为各品牌应用注入强大动力，服务于12个行业，并提供丰富多样的行业解决方案体验。

作为一家为全球客户提供**3DEXPERIENCE** 解决方案的领导者，达索系统致力于推动人类进步。达索系统为企业和客户提供协作式虚拟环境以模拟可持续创新。我们的客户利用 **3DEXPERIENCE** 平台和应用程序创建现实世界的“虚拟孪生”，推动了业务在创新、学习和生产的突破。

达索系统2万多名员工致力于为来自150多个国家或地区各行各业超30万不同规模的客户带来价值。更多信息敬请访问 www.3ds.com。



欧洲/中东/非洲
Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay Cedex
France

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

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