



從靶點到候選藥物：

電腦模擬加速並優化生物藥品研發



©2025達梭系統版權所有，翻印必究。保留所有權利。3DEXPERIENCE、Compass 圖示和 3DS 標誌、CATIA、SOLIDWORKS、ENOVIA、DELMIA、SIMULIA、GEOVIA、EXALEAD、3D VIA、BIOVIA 和 NETVIBES a 均為達梭系統或其子公司在美國和/或其他國家的商業商標或註冊商標。其餘所有商標皆歸各自所有者所有。使用達梭系統或其子公司的任何商標均需獲得其明確的書面核準。



引言：

由經驗判斷走進AI賦能，加速生物藥品的研發進程

生物藥品的研發過程向來漫長而且複雜，過於依賴反復試錯，這使得成本一直處於高位且成功率相對較低。長期以來，藥物研發主要依靠經驗判斷、偶然發現，以及耗時繁瑣的實驗室工作來識別、測試乃至優化候選藥物。然而，隨著行業朝著新型治療方法和個性化醫療的方向轉型，生物製藥領域面臨著諸多新的挑戰。包括加快研發進度、降低失敗風險，以及應對生物製藥生產複雜性等行業需求。

本電子書將深入剖析實驗室數位化和人工智慧（AI）賦能的電腦模擬技術如何重塑藥品開發流程，助力生物製藥企業縮短上市週期、提升候選藥品品質、優化生物過程開發，並確保符合監管標準。BIOVIA憑藉前沿技術，提供了一套全面的應用解決方案，助力研發人員設計和開發高質量生物藥品，從而在突破性療法的研發競爭中搶佔先機。



目錄

生物藥品研發的複雜性	3
從標靶到候選藥物： 更智慧化的藥物開發策略	4
第一步： 建構疾病相關的生物靶點模型	5
第二步： 減少實驗和研發測試循環次數	6
第三步： 開發並優化Bioprocess，以確保生物治療藥物的 安全性與療效	7
第四步： 提高候選藥品的安全性指標	8
電腦模擬與仿真技術的影響	9

生物藥品研發的複雜性

藥物發現常被比喻成「大海撈針」—— 研究人員得從數以百萬計的潛在治療分子裡面，篩選出極少數能夠和靶點結合的候選藥品。即便如此，這些候選藥品當中，絕大多數還是無法達到預期的臨床治療成效，這讓藥品發現變成了一個高成本、長週期、高風險的過程。

核心挑戰

1. 識別並驗證合適的靶點

靶點辨識是藥物發現的基礎，但這個過程仰賴多步驟逐步推進的嘗試。研究人員必須進行精確的實驗以確保其相關性，在這個階段，每一步的疏失都會使最終的結論走上錯誤方向。

2. 篩選和優化候選治療藥物

生物藥（例如抗體、肽類）必須經過嚴格的測試以驗證其療效、安全性和可生產性。為滿足嚴格的監管標準，通常需要經歷多輪篩選與優化，這進一步加深了生物製藥發現的複雜性和需耗時的特性。

3. 建立規模可擴展的生產過程

即使找到具有治療前景的候選藥品，確保其在大規模生產中的穩定性和可擴展性仍然是一項重大挑戰。生物藥品的生產工藝極為複雜，需要精細的製造過程來確保產品的品質和效率。

「及早淘汰」策略加速成功

在生物製藥研發中，「及早淘汰」策略相當關鍵。分子模擬建模以及人工智慧和機器學習技術，能夠協助研究人員在研發早期階段，剔除那些潛力不高的候選藥物，藉此避免後續投入昂貴的實驗室測試以及臨床試驗。這一策略促使研發團隊將資源集中，專注於最具發展前景的候選藥品，進而節省時間、降低成本，並提高研發的成功率。

分子建模和人工智慧/機器學習的優勢

BIOVIA的生物治療藥物設計解決方案能夠有效應對上述挑戰，減少對大規模實驗的依賴，並幫助研究人員實現：

- **更早預測結果：**優先考慮高治療潛力的候選藥品。
- **優化研發流程：**減少浪費，加快研發進度。
- **降低研發成本：**集中資源於高質量候選藥品。



數據透視：藥物發現面臨的挑戰

20億美元¹

單個藥品從研發到上市的平均成本

10年以上¹

藥物發現與研發的常規週期

臨床試驗通過率僅10%²

近年來，候選藥物的臨床試驗成功率持續降低。

數據來源：

¹ DiMasi, 2014; DiMasi et al., 2016

² 《2011–2020年臨床開發成功率及影響因素》

從靶點到候選藥品： 更智能的藥品發現策略

新型生物治療候選藥物的發現不僅要求精度高、速度快，還需符合監管要求、商業戰略定位及市場預期。BIOVIA解決方案通過整合行業領先的分子模擬建模與模擬技術，以及人工智慧和機器學習策略，將會徹底革新藥品發現的歷程。

研究人員可借助電腦模擬技術深入洞察分子的行為，精準預測實驗結果，高效識別並優化候選藥品，從而減少對昂貴且耗時的實驗的依賴。

BIOVIA將“品質源自設計”（Quality by Design）理念融入藥物發現的每一階段，在加速研發進程的同時，確保候選藥品達到臨床和市場成功的最高標準。

這一策略的核心是精確預測並最佳化生物治療藥品的關鍵特性，包含：

- 親和力：候選藥品與靶點的結合能力為何？
- 療效：候選藥品能否達成預期的治療成效？
- 安全性：候選藥品是否有存在毒性或不良反應的風險？
- 可擴展性：相關的生物過程能否支援大規模且穩定的生產？

透過及早最佳化這些關鍵要素，研究人員能夠將焦點放在最具發展潛力的候選藥品上，進而降低後期失敗的風險，精進生物製程的研發，加速新藥上市的時程。

生物治療藥物的發現路徑



這一系列步驟構築出一條高效的生物治療藥物研發途徑，協助研究人員更快速、更高效地推出創新療法，為研發成功注入強大信心。



第一步：

建構疾病相關的生物靶點模型

生物藥品發現的第一步是建構疾病相關的生物靶點模型。這一環節至關重要，因為它直接關係到後續治療靶點的選擇。然而，傳統的靶點識別方法高度依賴繁複的實驗，耗時費力。

BIOVIA Biotherapeutics Design系列解決方案通過電腦建模與模擬技術，極大地最佳化了這一過程，幫助研究人員減少不必要的實驗環節，使他們專注於高潛力的藥物靶點。

BIOVIA的電腦建模方法如何助力靶點識別

- 建構生物靶點的3D精細模型，高效識別可成藥結合位點。
- 分析基因和蛋白序列。
- 模擬分子動力學和蛋白質翻譯後突變，評估其對靶點結構、行為及功能的影響。

這一方法可大幅加速藥物靶點識別，提升生物藥品發現效率，節省大量時間與資源

電腦靶點建模之關鍵優勢

3D蛋白質建模，提供精準的結構和功能洞察。

進行虛擬實驗，優先開發可成藥的靶點。

基因和蛋白質序列分析，識別全新靶點。

核心技術解決方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Pipeline Pilot



第二步：

減少實驗和研發測試循環次數

生物藥品發現的第二步著重於減少“設計-合成-測試”循環的次數。

利用**BIOVIA Biotherapeutics Design**系列解決方案，研究人員可以採用電腦模擬方法對潛在的候選藥物進行虛擬評估，從而減少對傳統實驗的依賴，提升藥品發現效率。

BIOVIA電腦建模與模擬技術如何優化候選藥物測試

- 利用同源建模或基於AI技術生成目標蛋白質的3D結構，為蛋白質-蛋白質對接提供穩健可靠的起始模型。
- 結合人工智慧和基於物理的建模技術，預測並最佳化候選藥物的靶點親和力、療效和安全性。
- 進行分子動力學模擬，深入分析分子行為，探索藥品作用機制。
- 支持先進的生物藥研發形式（如雙特異性抗體、單鏈可變區片段、抗體-藥物偶聯物等），助力研究人員識別最具潛力的候選藥物。

通過減少低潛力候選藥物的測試循環次數，研究人員得以將資源集中在更具發展前景的藥品上，從而優化研發流程，提高整體成功率。

電腦靶點建模的關鍵優勢

快速評估多種候選治療藥物，最大程度降低實驗室成本。

早期預測藥物關鍵特性，優化候選藥品選擇。

利用先進的分子建模和人工智慧技術，提高生物治療藥品品質。

核心技術解決方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration

第三步：

開發並優化Bioprocess，以確保生物治療藥物的 安全性與療效

生物藥品發現的第三步著重於運用電腦模擬技術最佳化候選治療藥物，確保其在規模化生產中維持生物學特性的完整性和規模可擴展性。

運用BIOVIA Biologics Process Development系列解決方案，研究人員可以將實驗室數據數位化，有效因應生物工藝開發中的挑戰，從而高效產出既安全有效又符合品質和產量要求的治療藥物。

BIOVIA實驗室資訊解決方案如何重塑生物過程開發

- 在上下游開發過程中，設計、記錄並最佳化細胞株、細胞培養基以及其他過程參數。
- 運用既往工作數據，例如類似細胞株和過程條件的數據，避免從零開始。
- 運用實驗設計（design-of-experiments）和預測建模（predictive modeling）等工具，在開發初期及早識別並規避潛在的開發難題。
- 結合親和力、療效和安全性預測與生物工藝開發的產量數據，精緻化生產策略。

這一方法透過融合既往經驗積累和計算模型優勢簡化生物過程開發，為建立穩定可擴展的生產過程節省了寶貴的時間資源。

Bioprocess最佳化的關鍵優勢

利用虛擬技術最佳化Bioprocess參數，最大程度減少錯誤環節。

充分運用經驗證過的知識，提升生產效率，降低風險。

將生物過程開發與企業目標相結合，重點關注可擴展性和可持續性。

核心技術解決方案：

BIOVIA ONE Lab

流程執行

樣品管理

設備管理

庫存和材料管理

電子實驗記錄（ELN）



第四步：

提高候選藥品的安全性指標

生物藥物發現的步驟著重於提升候選藥品的製劑特性以及安全性。一旦識別出成功潛力高和可擴展性的分子，研究人員即可運用電腦模擬技術最佳化這些候選藥物。

W利用BIOVIA Biotherapeutics Design系列解決方案，研究人員可以提升候選藥物的安全性及製劑特性。

BIOVIA的電腦建模與仿真技術如何確保候選藥物的安全性和穩定性

- 預測潛在的免疫原性問題，通過抗體人源化策略開發安全的治療方案，從而規避代價高昂的I期臨床試驗失敗風險。
- 評估溶解度、粘度和聚集傾向等生物物理性質，及早因應穩定性挑戰。
- 通過虛擬測試優化候選藥物，允許進行修飾或採用獨特製劑方案，提升藥物的安全性和穩定性。

這一方法可以最大程度地減少藥物開發後期的意外事件，減低調整所需的成本，確保生物製劑能獲得最佳化，同時保障病人安全。

先導化合物最佳化的關鍵要點

採用有文獻佐證支持的抗體人源化方案，能有效地降低藥物的免疫原性。

識別溶解度和聚集特性等穩定性挑戰，提升臨床開發的成功率。

最佳化製劑特性，以支援靈活的生產及藥物遞送方式，並延長儲存與保存期限。

核心技術解決方案：

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration

電腦建模與模擬技術的影響

BIOVIA的電腦建模與模擬解決方案套組融合了人工智慧和機器學習模型，極大的加速了藥品發現的進程。結合BIOVIA強大的工藝開發功能，這些解決方案將助力生物制藥企業在確保藥品品質和可擴展性的前提下，快速推進生物藥的發現與開發。

從靶點識別到候選藥品開發，BIOVIA全面支持並優化藥品發現與開發流程的每一個環節，在生物新藥研發的激烈競逐中，賦予研究人員極為顯著的競爭優勢。

關鍵優勢

- **加速靶點識別：**快速識別生物學相關靶點，聚焦最具開發潛力的候選藥品。
- **加強目標藥品靶點親和力：**識別具有高親和力的候選分子，改善藥物治療效果。
- **改善生物活性：**開發具有更高臨床成功潛力的生物治療藥品。
- **優化安全性指標：**早期識別並解決免疫原性等安全性問題，減少後期風險。
- **提升生物程式的產量：**最佳化可擴展性和穩定性，以符合高效生產的需求。

如何協助生物藥的研發

擴大藥品發現範圍

僅需短短**數小時**，就可對幾千種分子進行虛擬篩選

提升成功機率

虛擬設計的抗體候選分子的成功率高達**75%至80%**

提升正確性

高達**90%**的候選分子在靶點相互作用方面有所改善

節省時間

早期發現階段用時縮短最多可達**60%**

節省成本

早期研發成本節省**40%至60%**

数据来源：BIOVIA内部分析



從靶點到候選藥品

在過去二十年間，製藥行業迎來了前所未有的創新高潮。生命科學領域的領軍企業正與BIOVIA（達梭系統旗下知名品牌）攜手合作，共同加速藥品發現與開發進程。BIOVIA提供全面的分子建模與模擬解決方案套件——Discovery Studio，能夠覆蓋從靶點識別到先導化合物最佳化的整個藥物研發流程。

該解決方案配備了一系列功能強大的工具，助力計算化學家與計算結構生物學家，設計出穩定且高品質的新型生物治療藥物。

隨著藥物從發現階段逐步邁向開發、臨床生產和商業化運營，數據可追溯性在每個階段都扮演著至關重要的角色。為此，BIOVIA ONE Lab解決方案為生物製藥企業開發新型生物治療藥物的所有科學流程和步驟提供全面支持。

如需瞭解更多資訊，敬請瀏覽：www.3ds.com/products/biovia/biotherapeutics-design-and-optimization。



我們的 3DEXPERIENCE® 平臺為各品牌應用注入強大動力，服務於12個行業，提供豐富多樣的行業解決方案體驗。

作為一家為全球客戶提供 3DEXPERIENCE 解決方案的領導者，達梭系統致力於推動人類進步。達梭系統為企業和客戶提供協作式虛擬環境以模擬可持續創新。我們的客戶利用3DEXPERIENCE 平台和應用程式創建現實世界的“虛擬孿生”，推動了業務在創新、學習和生產的突破。

達梭系統2萬多名員工致力於為來自150多個國家或地區各行各業超過30萬不同規模的客戶帶來價值。更多資訊，敬請瀏覽網頁www.3ds.com。

