

分子から 医薬品へ

バイオ医薬品の画期的進歩の実現に
BIOVIA Discovery Studioを活用した
事例のケーススタディ



©2024 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, the Compass icon and the 3DS logo, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALEAD, 3D VIA, BIOVIA and NETVIBES are commercial trademarks or registered trademarks of Dassault Systèmes or its subsidiaries in the U.S. and/or other countries. All other trademarks are owned by their respective owners. Use of any Dassault Systèmes or its subsidiaries trademarks is subject to their express written approval.



今日のバイオ医薬品業界の情勢の特徴は、その複雑性にあり、ますます複雑化する疾患プロファイルに対し、改善された特異性、安全性および作用機序を持つ医薬品が切実に求められています。

BIOVIA Discovery Studioは、このような課題に対応するため、30年以上に及ぶピアレビュー研究と、分子力学、自由エネルギー計算、バイオ医薬品の開発適合性評価等の世界最高クラスの*in silico*技術の一つの共通環境に統合した、強固なソリューションを提供します。

この包括的なソリューションは、ライフサイエンスの研究者が、タンパク質化学の微妙な差異を検討し、創薬ターゲットの特定からリード化合物の最適化に至るまで、低分子・高分子医薬品の創薬を推進できるようサポートします。

以下のケーススタディでは、業界をリードするバイオテクノロジー企業や製薬企業が、Discovery Studioをどのように活用して、業界の課題に対処し、研究・開発プロセスを効率化し、患者様の転帰を向上させる新たな治療薬を開発しているのかをご覧に入れます。



目次

はじめに	2
業界随一のCDMOが、先進的な <i>in silico</i> ツールを利用して、抗体医薬品のパイオニアに	3
韓国のバイオテクノロジー分野のスタートアップ企業が、分子モデリングを活用し、免疫療法の研究を推進	4
日本の製薬企業が、シミュレーションと自動化により、皮膚科領域の革新を加速化	5
グローバルなバイオテクノロジー企業が、予測に基づく抗体設計により、癌治療を具現化	6

業界随一のCDMOが、先進的な*in silico*ツールを利用して、抗体医薬品のパイオニアに

中国に本社を置く業界随一のグローバルな医薬品開発製造受託機関（CDMO）は、治療転帰の向上と研究・開発プロセスの加速化を低コストで実現することを目標として、新規の抗体医薬品の開発に専念しています。

課題

本クライアントは、研究・開発費用を削減し、市場参入を速めなければならない重圧の下で、より精度を高めて創薬プロセスを向上させるために、タンパク質の最適化、分析および創薬ターゲットのスクリーニングに利用できる先進的な*in silico*ツールを求めています。

解決策

本クライアントは、BIOVIA Discovery Studioを導入して抗体医薬品の開発向けの*in silico*ツールを利用することにより、自社の研究・開発を刷新しました。本ソリューションは、以下の機能により、タンパク質の物性計算、配列アノテーション、構造予測、ヒト化や創薬可能性分析を容易に実施できるよう支援して、候補化合物の特定・設計を実現し、ラボ作業を効率化しました：

- ・ 物理化学的特性、構造的安定性および標的との結合親和性に焦点を当てた包括的なシミュレーションおよび分析
- ・ ウェットラボ実験や意思決定を促進する、抗体モデルの詳細な品質分析のプロトコル

成果

Discovery Studioにより、本CDMOは以下の成果を実現し、新規の有効な抗体医薬品の創薬における研究・開発の効率を大幅に向上させることができました：

- ・ 医薬品開発のスケジュールの加速化
- ・ 失敗のリスクの最小化
- ・ 候補分子のメカニズムに関する、より深い洞察の獲得



「*in silico*ツールは、私たちの創薬サービスのプロセスに、革新的な活力を吹き込んでくれました。私たちは、Discovery Studioを利用して、自社のプロテオミクスデータ、ゲノムデータ、薬理学的データの解析能力を拡大し、クライアントが、新たな創薬ターゲットや、より有効な治療戦略を見出すことができるよう支援しています。」

韓国のバイオテクノロジー分野のスタートアップ企業が、分子モデリングを活用し、免疫療法の研究を推進

韓国を拠点とする新興の本バイオテクノロジー企業は、他に治療選択肢がない患者様のための免疫再生治療の開発に専念しています。そのミッションは、これまで治療不能と考えられてきた疾患に対し、新規の治療を提供することです。

課題

本バイオテクノロジー企業は、自社の新技術を免疫再生治療のために最適化する上で、課題に直面していました。この新技術を最大限に活用するためには、本技術における分子間相互作用に関する洞察を深める必要がありました。

解決策

このような課題に対処するために、本企業は、in vitroおよびin vivo試験と併せて、自社の社内データを、*in silico*実験に利用しました。主軸となる作業には、BIOVIA Discovery Studioを使用しました。

- 細胞外小胞ソーティングモチーフ（ESM）の構造を予測することにより、タンパク質との相互作用に関する洞察を獲得
- タンパク質間ドッキングおよび多量体構造予測の手法により、分子間相互作用を検討

成果

BIOVIA Discovery Studioの利用により、以下の成果が実現したため、本クライアントの技術は大幅に向上しました：

- 分子間相互作用に関する洞察を深められたことにより、本企業の基盤技術においてボトルネックとなっていた障害を克服
- 本企業の革新的な治療薬の可能性および有効性を最大化



日本の製薬企業が、シミュレーションと自動化により、皮膚科領域の革新を加速化

日本を拠点とする本製薬企業は、皮膚疾患に対する外用薬の研究・開発・製造に重点的に取り組んでいます。本企業は、症状を改善して患者様に喜びと幸せを届け、患者様が通常の生活に戻れるようにすることを目標としています。

課題

研究・開発期間の短縮およびコストの削減という業界共通の課題に直面した本クライアントは、自社の仮説を *in silico* で検証し、新たな治療薬の上市までの過程を効率化するための方法を模索していました。

解決策

本クライアントは、BIOVIA Discovery Studioの機能を活用して以下を実施することにより、医薬品候補化合物の徹底的な探索に乗り出しました：

- ・ 当該薬剤の作用機序に関する詳細な洞察を提供し、創薬ターゲットの特定と、候補リード化合物の最適化のための改良の両方をサポートする、分子モデリングおよびシミュレーション
- ・ 自動化により効率性を高め、カスタムワークフローを作成・展開し、様々なデータソース、データベース、サードパーティー・ツールや自社ツールを統合する、BIOVIA Pipeline Pilotの利用

成果

本企業は、Discovery StudioとPipeline Pilotを自社のワークフローに組み入れることにより、以下を実現しました：

- ・ 新製品の上市に関わる作業時間とコストを、いずれも大幅に削減することに成功
- ・ 創薬ターゲットの特定からリード化合物の最適化に至るまで、科学的プロセスを一から推進
- ・ 個人レベルの生産性を向上させ、チーム間の協働関係の向上を促進



グローバルなバイオテクノロジー企業が、予測に基づく抗体設計により、癌治療を具現化

腫瘍領域を専門として臨床開発を行う、フランスの本バイオテクノロジー企業は、免疫系を利用して癌に対抗する抗体医薬品を開発することにより、患者様の転帰を向上させることを目標としています。

課題

本企業は、自社の医薬品の有効性を向上させるために、最も有望な医薬品候補抗体の特性評価および最適化、ならびに標的との結合の強化を行うことができる *in silico* の手法を模索していました。

解決策

本企業は、BIOVIA Discovery Studioを利用して、最も親和性の高い、最適なバリエーションを特定しました。同社の戦略の重要な一端として、ヒト化のプロトコルを利用して、医薬品候補抗体の免疫原性を低下させました。

成果

BIOVIA Discovery Studioにより、以下の成果を実現することができました：

- ・ 免疫細胞と腫瘍細胞の両方を標的とする多重特異性抗体を、バーチャル環境で予測・設計
- ・ 実試験を実施する必要性が低下し、時間とリソースを削減
- ・ より免疫原性の低い抗体の開発により、安全性と有効性が向上
- ・ より優れた抗体の開発により、患者の転帰が向上

「Discovery Studioの予測機能のお蔭で、実験の実施を減らすことができ、時間とコストが大幅に削減されています。また、より良い成果を達成して、患者様のために、より優れた抗体を開発しています。」



分子から医薬品へ

製薬業界は、過去20年にわたり、イノベーションブームを迎えています。ライフサイエンス業界のリーダーたちは、ダッソー・システムズのブランドである BIOVIAと提携し、BIOVIA Discovery Studioを利用して、創薬のスピードを加速させています。Discovery Studioは、ライフサイエンスの創薬研究のための、最も包括的な3Dモデリング・シミュレーションのソリューションとして、独自の地位を築いています。

本ソリューションは、計算化学者や計算構造生物学者が、望ましい安全性プロファイルを備え、安定性を有し、最適化された新規のバイオ医薬品や低分子医薬品を設計することを可能にする、幅広い種類の強力なツールを提供します。

詳細については、www.3ds.com/products/biovia/discovery-studio をご覧ください。



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' 20,000 employees are bringing value to more than 270,000 customers of all sizes, in all industries, in more than 140 countries. For more information, 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