

從分子到藥物

利用BIOVIA Discovery Studio
實現生物製藥突破的案例研究



©2024達梭系統版權所有。翻印必究。3DEXPERIENCE、Compass 圖示和3DS標誌、CATIA、SOLIDWORKS、ENOVIA、DELMIA、SIMULIA、GEOVIA、EXALEAD、3D VIA、BIOVIA和NETVIBES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。其他所有商標均歸其各自所有者。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准。



現今的生物製藥領域正面臨日趨複雜的挑戰，面對極為複雜的病理表現，開發特異性更高、安全性更強、更精準作用機制的藥物成為當務之急。

BIOVIA Discovery Studio提供了可靠解決方案，以應對以上挑戰，它將30多年來經過行業審核過的研究成果與世界級的計算機模擬技術（包括分子力學、熱力學計算、生物醫藥研發等）整合為一體的通用環境。

這一整套全面的解決方案支持生命科學研究人員探索蛋白質化學的微妙之處，並從靶點識別到先導化合物優化，全方位助力小分子和大分子治療藥物的發現。

以下案例研究展示了領先的生物技術和製藥公司如何利用Discovery Studio應對行業挑戰，簡化研發流程，開創全新療法。



目錄

簡介	2
一家全球頂尖的CDMO公司利用先進的電腦模擬工具開創抗體治療新局面	3
一家韓國生物技術新創公司利用分子建模技術推動免疫療法研究	4
一家日本製藥公司通過模擬和自動化技術加速皮膚疾病的治療創新	5
一家全球生物技術公司通過預測性抗體設計打開癌症治療新思路	6

一家全球頂尖的CDMO公司利用先進的電腦模擬工具開創抗體治療新局面

該客戶是一家總部位於中國的全球頂尖合同開發和製造公司（CDMO），致力於開發療效更佳的新型抗體治療藥物，目標是在提升治療效果的同時加速其研發過程，保證可控成本。

挑戰

面對降低研發費用和加快產品上市的壓力，該客戶希望尋求先進的電腦模擬工具，助力蛋白質優化、分析和靶點篩選，透過用更加精準的方式改進其藥物發現流程。

解決方案

該客戶選擇了BIOVIA Discovery Studio，利用電腦模擬工具改變了其抗體療法的研發流程。該解決方案提供了蛋白質性質計算、序列注釋、結構預測、人源化和成藥性分析等多種工具，並通過以下方式識別並設計了候選的化合物，簡化了實驗室工作：

- 專注於藥物的理化特性、結構穩定性和靶點親和力的全面模擬和分析。
- 提升濕實驗效率和輔助決策制定的抗體模型品質分析方案。

效果

Discovery Studio通過以下幾方面顯著增進了該CDMO公司研發新型高效抗體治療藥物的效率：

- 加快藥物開發進度。
- 降低失敗風險。
- 更加深入地洞察候選分子的作用機制。



“電腦模擬工具為我們的發現藥物的過程注入了創新活力。通過Discovery Studio，我們擴充了蛋白質組學、基因組學和藥理學數據資料分析的能力，得以更好地幫助客戶挖掘全新治療靶點和更有效的治療策略。”

一家韓國生物技術新創公司利用分子建模技術推動免疫療法研究

該客戶是一家位於韓國的新興生物技術公司，致力於再生免疫療法的研發，旨在為缺乏其他治療選擇的患者帶來福音。他們的使命是為曾經的不治之症開創新的治療方法。

挑戰

這家生物技術公司在優化其新型再生免疫療法技術時遭遇了挑戰。他們需要加強對分子相互作用的洞察，以期充分發揮該治療技術的潛力。

解決方案

為了應對這些挑戰，該公司將其自有的離體和活體條件下採集的數據應用於電腦模擬研究。他們使用BIOVIA Discovery Studio完成了以下關鍵任務：

- 預測細胞外囊泡分選模體（ESM）的結構，瞭解其與蛋白質的相互作用。
- 應用蛋白質-蛋白質對接和多聚體預測方法研究分子間相互作用。

效果

BIOVIA Discovery Studio通過以下幾方面顯著提高了該客戶的技術水準：

- 提供對分子相互作用更深入的洞察，從而突破該客戶平台技術中的瓶頸。
- 推進其創新療法潛力和療效的最大化。



一家日本製藥公司通過模擬和自動化技術加速創新皮膚疾病的治療

該客戶是一家日本製藥公司，專注於研究、開發和生產皮膚疾病的外用藥物。他們的目標是緩解患者症狀，幫助患者重拾快樂，恢復正常生活。

挑戰

為了應對加速研發和降低成本的行業挑戰，該客戶希望通過電腦模擬技術驗證假設，從而更迅速高效地推進新療法上市。

解決方案

該客戶利用BIOVIA Discovery Studio的強大功能，對候選藥物展開深入研究：

- 通過分子建模和模擬技術，深入瞭解藥物的作用機制，助力靶點識別和先導化合物優化。
- 利用BIOVIA Pipeline Pilot實現自動化，創建自訂工作流程，並將多個數據源、資料庫以及第三方或自建工具融為一體，大幅提升工作效率。

效果

通過在工作流程中應用Discovery Studio和Pipeline Pilot，該公司達成了以下成就：

- 以更快的速度和更低的成本將新產品投入市場。
- 從識別靶點到優化先導化合物，全方位推動科學研究過程。
- 提高每位員工的生產力，促進團隊間合作。



一家全球生物技術公司通過預測性抗體設計打開癌症治療新思路

該客戶是一家位於法國的臨床階段生物技術公司，致力於開發治療用抗體，用以提升免疫系統對抗癌症的潛能。

挑戰

該公司希望找到一種電腦模擬方法，表徵和優化最具潛力的抗體候選物，並加強它與靶點的結合，從而改善治療效果。

解決方案

該公司利用BIOVIA Discovery Studio，確定了親和力最高的最佳變異體。他們策略的關鍵部分是運用人源化方案，降低候選抗體治療藥物的免疫原性。

效果

BIOVIA Discovery Studio助力該公司達成以下成就

- 虛擬預測和設計同時針對免疫細胞和腫瘤細胞的多特異性抗體。
- 減少對物理實驗的需求，節省時間和資源。
- 開發更低免疫原性的抗體，提高安全性和有效性。
- 通過優勢抗體開發，改善患者預後發展。

“通過利用Discovery Studio的預測功能，我們減少了實驗數量，節約了大量時間和成本，還取得了更加傑出的成果，為患者提供更優質的抗體治療。”





從分子到藥物

二十年來，製藥行業不斷創新。生命科學行業的領軍者們正在與達梭系統旗下的BIOVIA品牌通力合作，利用BIOVIA Discovery Studio加速發現藥物。Discovery Studio獨具優勢，是為生命科學發現性研究打造的最全面的3D建模和模擬應用程式。

它提供一系列強大的工具，幫助計算化學家和計算結構生物學家設計穩定、完善的新型生物治療藥物和小分子藥物，同時符合預期安全性標準。

更多資訊敬請訪問：www.3ds.com/products/biovia/discovery-studio。



我們的**3DEXPERIENCE®**平台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**解決方案的工業軟體提供商，達梭系統致力於成為推動進步的催化劑。我們為企業和客戶提供可協同的3D虛擬空間來推動可持續創新。利用達梭系統的**3DEXPERIENCE**平台和行業解決方案，我們的客戶對真實世界進行虛擬孿生，從而重新定義其產品創造、生產和全生命週期管理過程，打造一個更可持續的世界。體驗經濟關注以人為本，造福消費者、患者和居民。

達梭系統為150多個國家超過30萬個不同行業、不同規模的客戶帶來價值。如欲瞭解更多資訊，敬請訪問：www.3ds.com。



歐洲/中東/非洲

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

亞太地區

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

