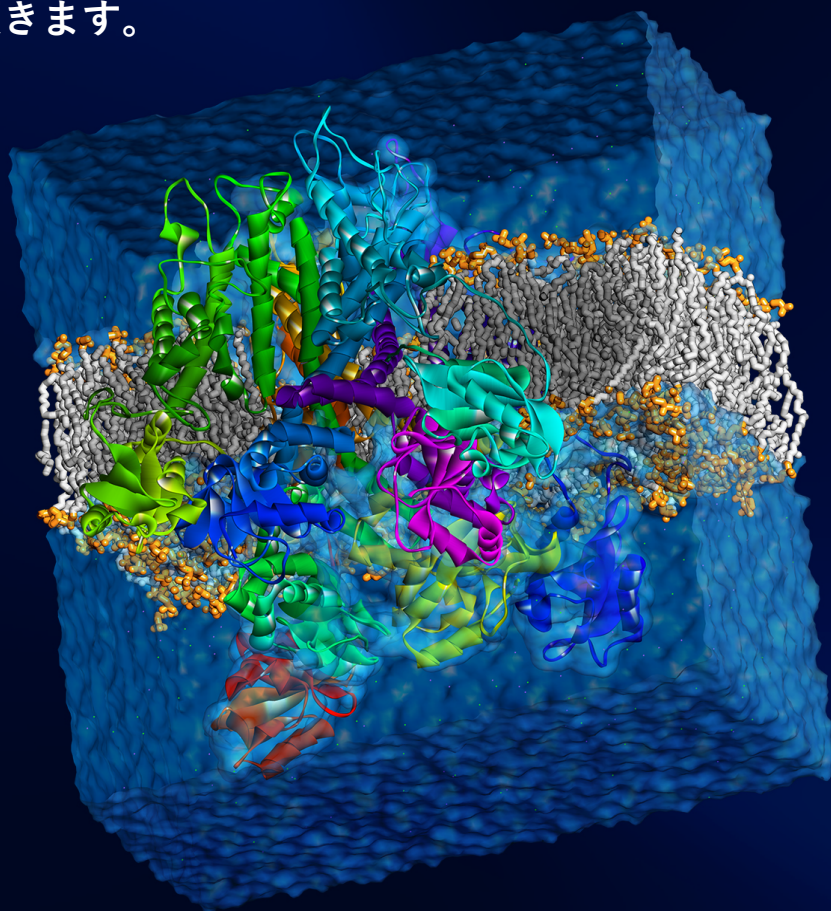


BIOVIA の最新科学

本セッションでは、創薬向け in silico ツールとして
近年 BIOVIA ポートフォリオに追加された新製品 / 新機能について
ご紹介させていただきます。



①Discovery Studio 2020 新機能のご紹介

Discovery Studio 2020 は、バージョン 2020 としてリリースされた一連の BIOVIA 製品の一方で、バイオ医薬品やシミュレーション、低分子究などの分野における重要な科学的進展が実装されています。本日は主な新機能として以下についてご紹介させていただきます。

1) Multi-Site Lambda Dynamics (MSLD)

一度のシミュレーションで複数のリガンドの相対的結合自由エネルギーを精度よく計算できる MSLD が、商用ソフトウェアとしては初めて Discovery Studio に搭載されました。

2) 露な脂質二重層膜を用いたシミュレーションのサポート

膜タンパク質に対して脂質膜や水、カウンターイオンから成るシステムを構築し、シミュレーションを行うことが可能になりました。

3) 生物製剤の溶解度や粘度を予測する新たなプロトコル

Calculate Protein Formulation Properties プロトコルによって、複数のタンパク質の物性を計算、比較できるようになりました。

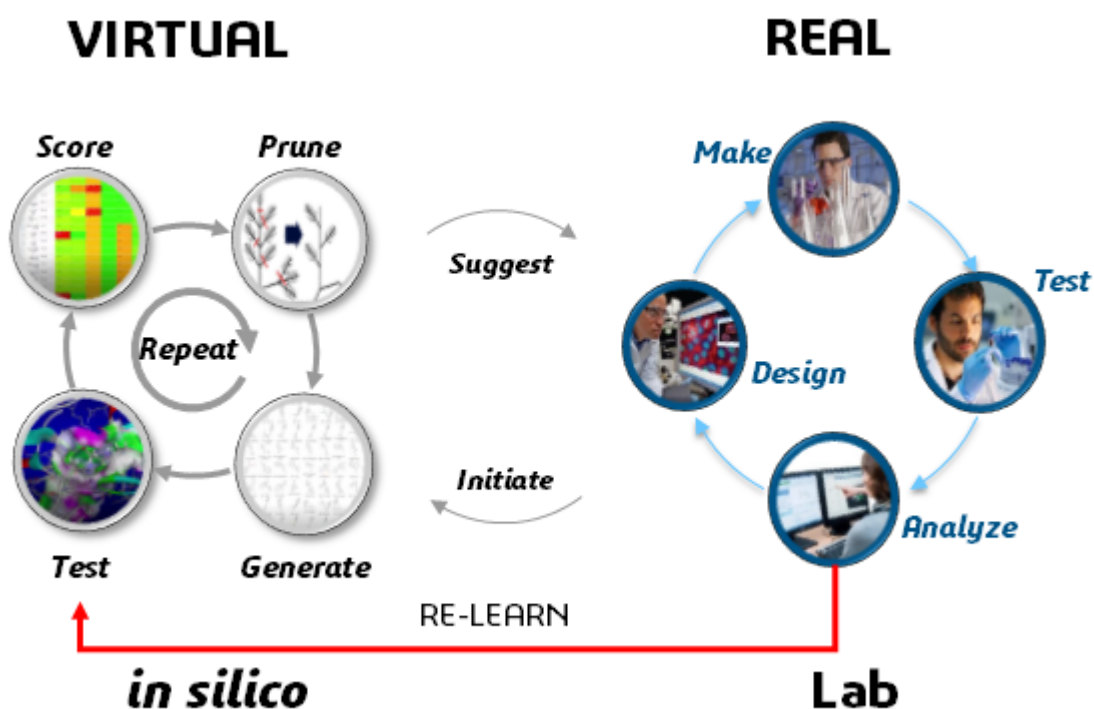
4) 新たなファーマコフォアモデル構築手法

いわゆる弱い相互作用を含むタンパク質-リガンド間非結合相互作用を基にファーマコフォアを自動生成 / 検証するプロトコルや、一連の大規模な活性 / 非活性リガンドからアンサンブル・ファーマコフォアを生成するための新たなプロトコルが追加されました。



リード化合物の最適化には平均5年で3000～6000化合物の合成が必要になります
 ダッソー・システムズ BIOVIA は AI と機械学習で、この課題に取り組みます！

BIOVIA Generative Therapeutics Design (GTD) は、AI を活用し、合成する前段階でのリード化合物の最適化を支援します。
 バーチャルで化合物を発生・評価し、合成する化合物の選抜を自動的に行うことで、コストがかかる実際の合成を最適化します。



Generative Therapeutics Design を使ったイノベーションサイクル

GTD のイノベーションサイクルは、アクティブラーニングを使って新しい化合物をデザインすることで、バーチャルとリアル (V+R) でリード最適化を行います。AI や機械学習でバーチャルなリード候補化合物を選抜し、それを実際に合成し、テスト結果を使ってよりよい機械学習モデルを作成します。このサイクルは、目的活性だけでなくアンチターゲット、安全性、毒性など、すべての目的のターゲットプロファイルを満たすまで繰り返されます。

GTD を採用いただくことで、研究領域でのビジネス革新を実現し、探索フェーズの時間短縮、臨床段階での成功確率の上昇、結果として貴社に莫大なコスト削減をもたらします。