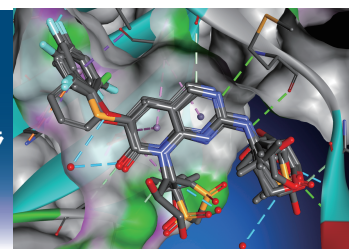


BIOVIA Discovery Studio 2021

Discovery Studio 2021 は 2021 年にリリースされた一連の BIOVIA 製品の一つで、今回も引き続きバイオセラピューティクスやシミュレーション、低分子研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。



【Discovery Studio 2021 に実装された新しい機能】

MSLD の作業がより快適に

- ・ 1 つのプロトコル (MSLD Bias Optimization and Production) に既存の 3 つのプロトコルを統合し、GPU 対応プラットフォームでシンプルかつ高度な CHARMM シミュレーションを実現
- ・ 1 回のシミュレーションでコンビナトリアル・ライブラリ全体の相対結合自由エネルギーを計算し、競合的結合アッセイを模倣
- ・ 大規模バリデーションにより、初期のリード最適化段階で大規模な同族化合物ライブラリを探索する本研究手法の精度を確認
- ・ 自由エネルギー摂動法 (FEP) よりも効率性が最大 20 倍向上

CHARMM-DOMDEC による FEP 計算に対応

- ・ 新しいプロトコル、CHARMM Relative FEP Calculations により、GPU 対応プラットフォーム (Linux) 上で両システム (リガンド系および複合体) の同時 FEP 計算が可能
- ・ 自由エネルギーを前進 (Forward) と後退 (Reverse) で予測
- ・ 終状態近傍でラムダの幅を狭めるカスタム・スケジュールを作成し、精度を向上させることが可能

原子タイプや力場のパラメータが追加

- ・ CGenFF を利用して低分子の原子タイプを階層的に指定する、精度と一貫性に優れたスキームを利用可能
- ・ 力場の結合パラメータや角度パラメータを拡張・改善し、CGenFF 力場を利用できるケミカルスペースを大幅に拡大

GPU 対応プロトコルにより、計算を高速化

- ・ Dock Proteins (ZDOCK) プロトコル: CPU よりも最大 13 倍高速
- ・ Dynamics (NAMD) and Solvate with Explicit Membrane プロトコル: 1 つの GPU で 8 コア CPU よりも 7 倍から 10 倍高速
- ・ MSLD Bias Optimization and Production プロトコル: グリッド・サーバーと非グリッド・サーバーの両方で動作
- ・ CHARMM Relative FEP Calculations (GPU): 新たに DOMDECGPU による FEP 計算をサポート

【Discovery Studio 2021 で強化された機能】

生物製剤の粘度や凝集の予測に関する機能が強化

- ・ Calculate Protein Formulation Properties プロトコルで Charge Map 表面や Aggregation Scores 表面を自動生成

タンパク質モデリング機能を多方面から強化

- ・ RCSB Structure Search: 従来の検索 API が 2020 年 11 月に廃止されたのを受けて、新しい JSON クエリをサポートするように
- ・ BLAST Search (NCBI Server): パフォーマンスと信頼性が向上
- ・ Analyze Protein-Ligand Complexes: 入力に複数のタンパク質を指定可能に
- ・ Predict Humanizing Mutations: パフォーマンスが向上し、生殖細胞系列ファイルの読み込みが容易に
- ・ Retrieve Antibody Templates from Database: 指定した抗体テンプレートをデータベースから取り込む際に利用できるサンプル・プロトコルが追加

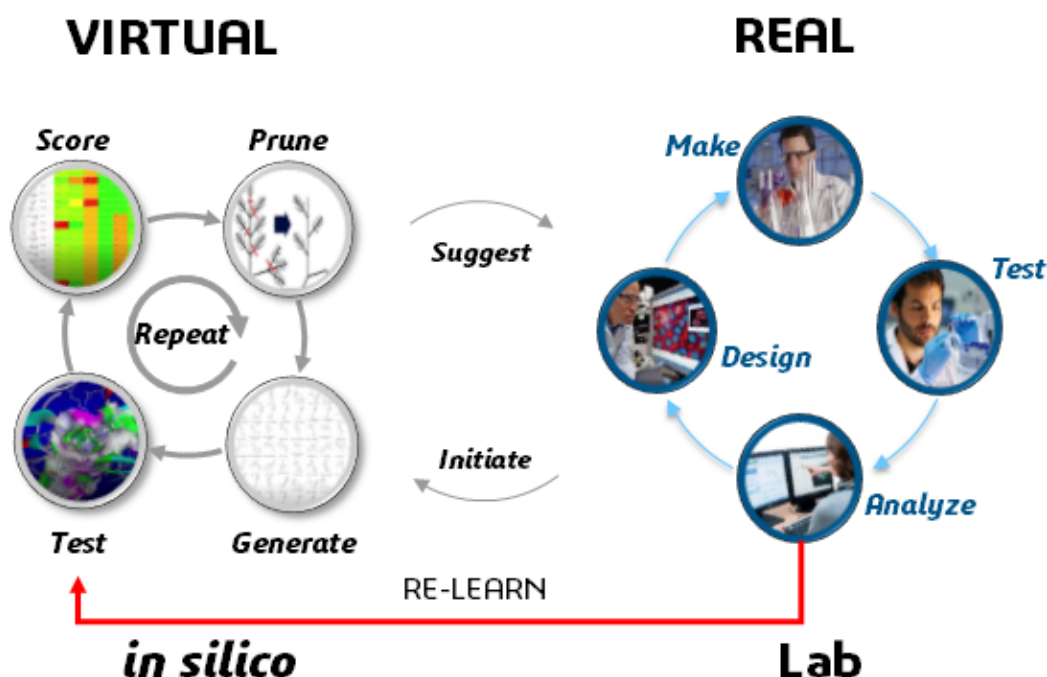
ファーマコフォア・モデリング機能を多方面から強化

- ・ リガンドベースのファーマコフォア・プロトコル、および Edit and Cluster Features ツールパネルで、非結合相互作用ファーマコフォア・フィーチャーがサポート
- ・ PharmaDB scPDB 受容体 - リガンド標的を更新し、非結合相互作用ファーマコフォア・フィーチャーが付加



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。