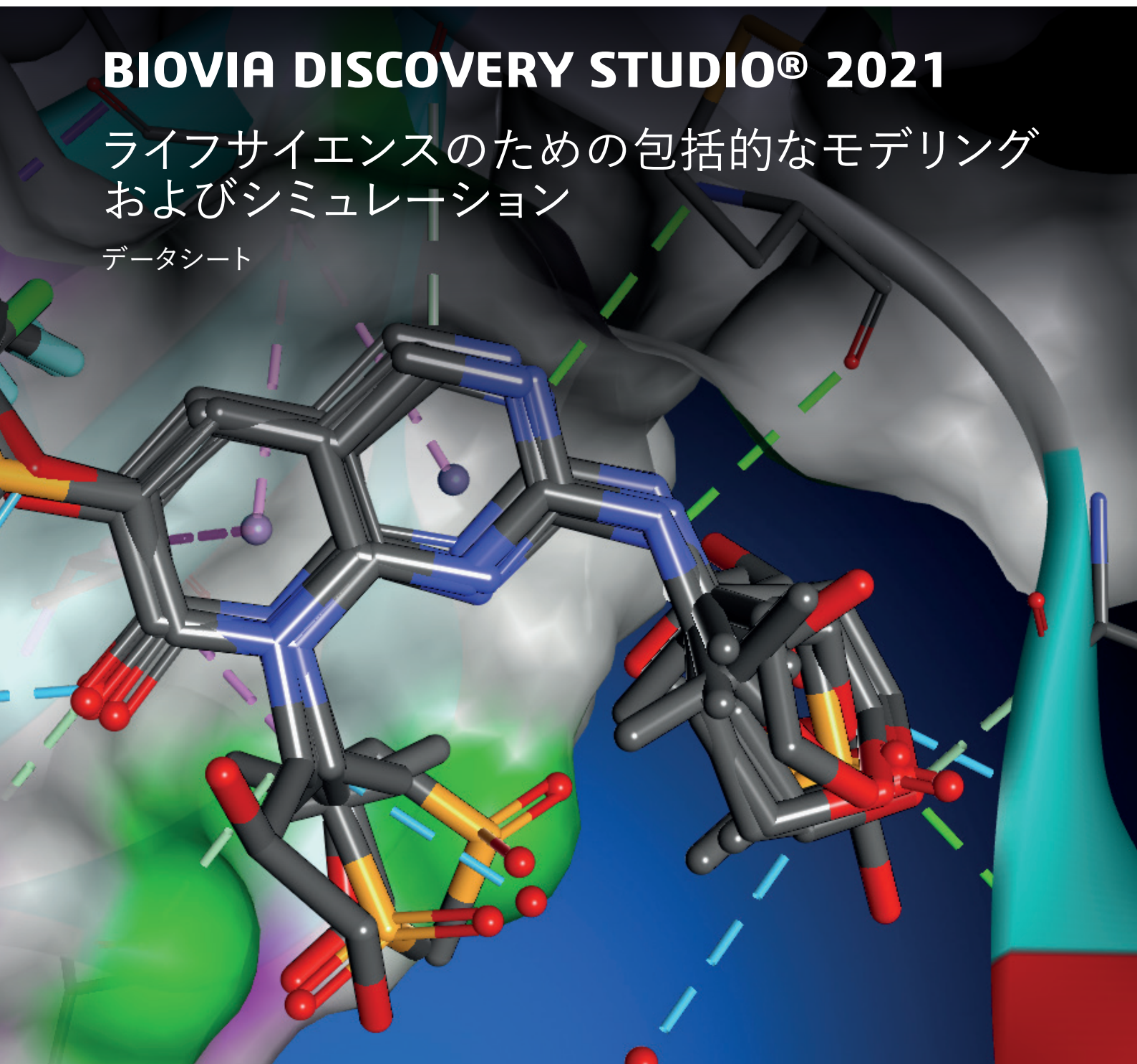


# BIOVIA DISCOVERY STUDIO® 2021

ライフサイエンスのための包括的なモデリング  
およびシミュレーション

データシート



## 最新の科学の成果を実装

複雑な生体分子系をモデリングして把握するためには、分子シミュレーションが必要不可欠です。BIOVIA の予測科学アプリケーション、Discovery Studio® の最新のリリースでは、MSLD (Multi-Site Lambda Dynamics) のワークフローがより使いやすくなり、より多くの GPU 対応プラットフォームを導入することで研究を加速させます。BIOVIA Pipeline Pilot™ をベースにして構築された Discovery Studio® は、ライフサイエンスの創薬研究分野に最適な、さまざまな機能を網羅したコラボレーティブなモデリング & シミュレーション・アプリケーションです。

### 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。

#### 新しい機能と強化された機能

**新しい機能！**MSLD<sup>1</sup> の作業がより快適になりました。

- 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<sup>2</sup>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

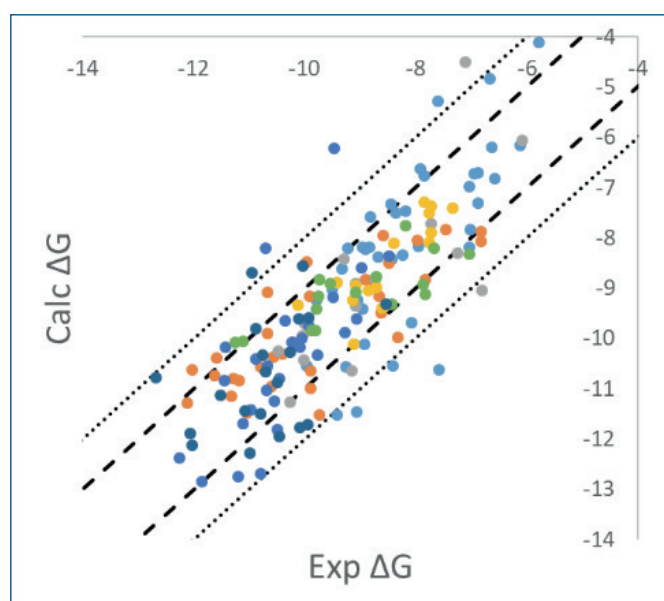


図 1: 7 つのタンパク質標的と 165 のリガンドを使用した MSLD バリデーション<sup>2</sup>。平均誤差 (AUE: average unassigned error) は 0.76 kcal/mol

**新しい機能！**CHARMm-DOMDEC による FEP 計算に対応しました。

- 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に

**新しい機能と強化された機能！**原子タイプや力場のパラメータが追加されました。

- 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

**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されました。

- Calculate Protein Formulation Properties プロトコルで Charge Map<sup>3</sup> 表面や Aggregation Scores<sup>3</sup> 表面を自動生成

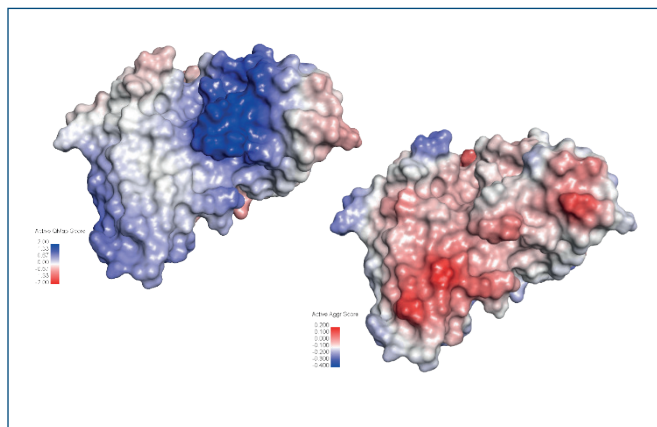


図 2: 抗体構造上の Charge QMap 表面 (左) と Aggregation Scores 表面 (右)

**強化された機能！**タンパク質モデリング機能を多方面から強化しました。

- RCSB Structure Search:** 従来の検索 API が 2020 年 11 月に廃止されたのをを受けて、新しい JSON クエリをサポートするように書き換えられました。
- BLAST Search (NCBI Server):** パフォーマンスと信頼性が向上しました。
- Analyze Protein-Ligand Complexes:** 入力に複数のタンパク質を指定できるようになりました。
- 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なりました。
- 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・プロトコルが追加されました。
- BLAST PDB データベースと Swiss-Prot データベースが自動的にインストールされます。

**強化された機能 !** ファーマコフォア・モデリング機能を多方面から強化しました。

- 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されました。
- PharmaDB scPDB<sup>4</sup> 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・フィーチャーが盛り込まれました。
- デフォルトのインストールで PharmaDB データベース全体が取り込まれ、必要なディスクスペースも最大 10GB から 0.27GB に縮小されました。

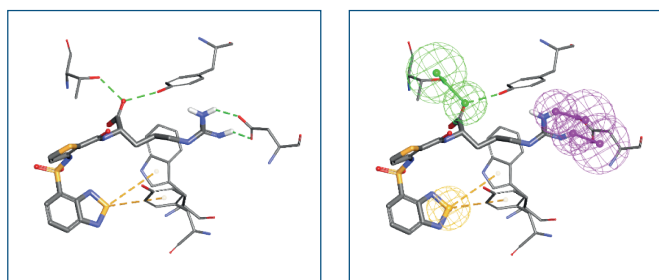


図 3: 「相互作用ファーマコフォア」と一致する「非結合の特徴認識」

**新しい機能 !** GPU 対応プロトコルにより、計算を高速化しました。

- 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 DOMDEC-GPU による FEP 計算をサポート

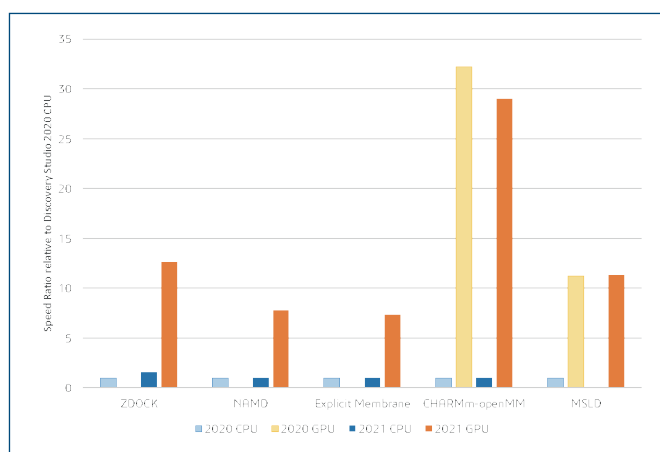


図 4: 2020 CPU バージョンと 2021 GPU 対応プロトコルの性能差を比較

**パートナーから提供されている機能**

- CHARMm:** アカデミック版 CHARMM の最新リリース、バージョン c44b2<sup>5</sup> が組み込まれています。
- NAMD:** CPU エディションと GPU エディションのバージョン 2.13 が配布されます。
- MODELER:** アカデミック版 MODELLER の最新リリース、バージョン 9.24<sup>6</sup> が組み込まれています。
- BLAST+:** Discovery Studio の BLAST+ のバージョンが 2.10.1 に更新されました。
- GOLD:** GOLD 2020 をサポートしています。

**互換性**

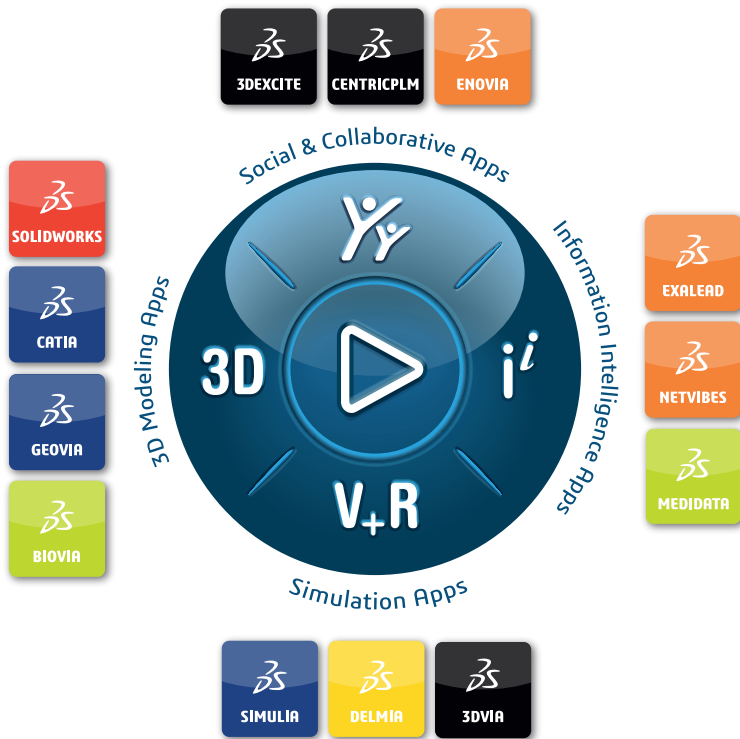
Discovery Studio 2021 は BIOVIA Pipeline Pilot 2021 をベースにして構築されています。

**データベース**

- 抗体データベースが更新され、PDB から最新の抗体テンプレート構造が取り込まれました (2020 年 7 月リリースの PDB がベース)。
- PDB データベースと PDB\_nr95 BLAST データベースが更新されました (2020 年 7 月の PDB データがベース)。
- 2020 年 7 月の Uni-Prot をベースにして Swiss-Prot BLAST データベースが更新されました。
- RCSB Structure Search プロトコルのリガンド・データベースが更新されました (2020 年 7 月、32,522 エントリー)。

**参考文献**

- Hayes R. L., Armacost K. A., Vilseck J. Z., Brooks III C. L., *J Phys Chem B.*, **2017**, 121, 3626-3635.
- Raman E. P., Paul T. J., Hayes R. L., Brooks III C. L., *J Chem Theory Comput.*, **2020**, 16, 7895-7914.
- Agrawal N. J., Helk B., Kumar S., Mody N., Sathish H. A., Samra H. S., Buck P. M., Li L., Trout B. L., *MABs.*, **2016**, 8, 43-8.
- <http://bioinfo-pharma.u-strasbg.fr/scPDB/>
- Brooks B. R., Brooks III C. L., Mackerell A. D., Karplus M., *et al*, *J. Comp. Chem.*, **2009**, 30, 1545-1615.
- Eswar N., Marti-Renom M. A. Webb B., Madhusudhan M. S., Eramian D., Shen M., Pieper U., Sali A., *Current Protocols in Bioinformatics*, John Wiley & Sons, Inc., **2006**, Supplement 15, 5.6.1-5.6.30.



ダッソー・システムズの **3DEXPERIENCE®** プラットフォームでは、11 の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは **3DEXPERIENCE** カンパニーとして、人々の進歩を促す役割を担います。当社は持続可能なイノベーションの実現に向けて、企業や人々が利用する 3D のバーチャル コラボレーション環境を提供しています。当社のお客様は、**3DEXPERIENCE** プラットフォームとアプリケーションを使って現実世界のバーチャル ツイン エクスペリエンスを生み出し、さらなるイノベーション、学び、生産活動を追求しています。

ダッソー・システムズ・グループの 20,000 名に及ぶ社員が、140 カ国以上、あらゆる規模、業種の 27 万社以上のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja)（日本語）をご参照ください。

ヨーロッパ / 中東 / アフリカ  
Dassault Systèmes  
10, rue Marcel Dassault  
CS 40501  
78946 Vélizy-Villacoublay Cedex  
France

アジア太平洋  
ダッソー・システムズ株式会社  
〒141-6020  
東京都品川区  
大崎 2-1-1  
ThinkPark Tower

南北アメリカ  
Dassault Systèmes  
175 Wyman Street  
Waltham, Massachusetts  
02451-1223  
USA

**DS** **DASSAULT SYSTEMES** | The **3DEXPERIENCE®** Company