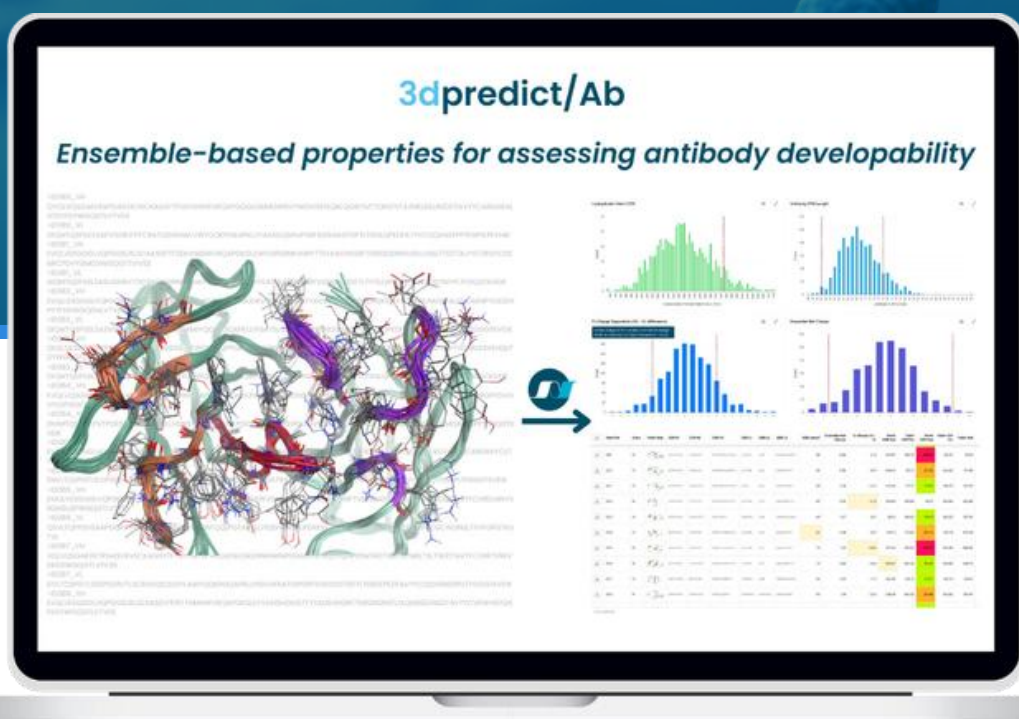
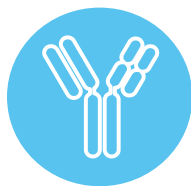


3dpredict/Ab

高品質な抗体構造モデリングと
物性推算を大規模に実行



開発可能性（Developability）とリスクプロファイルに
基づき抗体候補の優先順位付け



pH 依存性や柔軟性を
考慮したアンサンブル
ベースのタンパク質
物性推算



小規模から大規模の
抗体創薬グループ
まで利用可能なWeb
インターフェース



信頼性の高い安全な
クラウド環境
(ISO 27001) で
提供



独自のインシリコ手法による、 抗体の開発可能性評価の効率化

1. アミノ酸配列または立体構造データのアップロード

- 様々なフォーマットに対応: Fv、Fab、scFv、VHH、IgG、BsAb、ADC

2. タンパク質物性のアンサンブル計算の実行

- 100種類以上の特性・記述子を計算
- 高速なグランドカノニカルサンプリングを使用
- 確率的にプロトン化状態を変化させながら構造サンプリング
- 全体および残基ごとの特性計算 (例: pI、pKa)
- 非天然アミノ酸やコンジュゲート系を含む抗体構造のシミュレーション

3. 開発可能性とリスク部位を考慮したスクリーニング

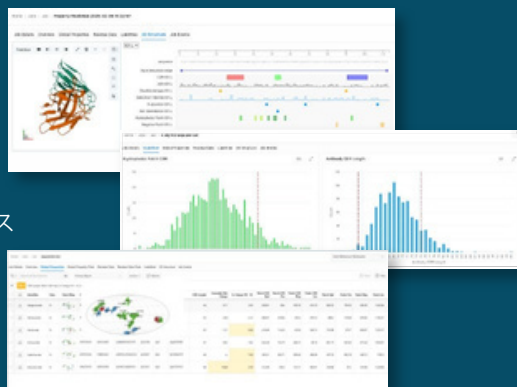
- 臨床段階の抗体との比較によるプロファイリング
- 凝集性の高い領域の特定
- 化学修飾部位やPTM部位の検出
- 配列上のリスク部位を自動的検出
- 2Dタンパク質表面パッチ解析による構造的特徴の評価

4. 解析と優先順位付け

- 配列および3D構造の表示
- 注射付きのリスク評価
- バックミュートーションのためのgermline配列の特定
- 残基ごとの特性プロットと比較
- 機械学習モデルに使用するための標準化データセットの生成

堅牢な技術基盤

- オンデマンド計算 (SaaS)
- 安全なエラスティッククラウド環境 (ISO 27001)
- ITインフラとソフトウェアの統合管理サービス
- RESTful APIによるシームレスな統合
- シンプルなジョブ投入
- ハイスループット計算



Discngine は Chemical Computing Group ULC のグループ会社です。記載の商品名は各社の商標または登録商標です。本カタログの仕様は予告なく変更することがあります。(2026.03)