

平成 27 年 7 月 17 日
特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ

第 2 回 IPAB コンテスト 『コンピュータで薬のタネを創る 2』 受賞グループ

「 」内はグループ名

○ヒット率部門グランプリ（NEC 賞）：

「IMSBIO」 代表者：（株）情報数理バイオ 望月正弘氏

○新規化合物部門グランプリ（JBIC 賞）：

「ソ創」 代表者：東京大学大学院医学系研究科（当時） 山本一樹氏

○リガンド効率部門グランプリ（ナミキ商事賞）：

「IMSBIO」 代表者：（株）情報数理バイオ 望月正弘氏

○優秀賞（シュレーディング賞）：

「チーム TSUBAME-2」 代表者：東京工業大学大学院情報理工学研究科 安尾信明氏

○優秀賞（DDN 賞）：

「Gromiha-Velmurugan」 代表者：インド工科大学マドラス校 マイケル・グロミハ氏

○学生奨励賞：

「ソ創」 代表者：東京大学大学院医学系研究科（当時） 山本一樹氏

「チーム TSUBAME-2」 代表者：東京工業大学大学院情報理工学研究科 安尾信明氏

「DEDENNE」 代表者：東京工業大学工学部情報工学科（当時） 鈴木翔吾氏

発見されたヒット化合物について

・ 標的タンパク質

ヒト C-Yes 酵素

・ 化合物の阻害活性測定実験

化合物の阻害活性は、化合物 10 μ M の固定された濃度で Promega 社の ADP-Glo kinase assay platform を用いたアッセイ試験により測定。まず、各化合物について 4 試験のプライマリ・アッセイを行い、そこで阻害活性が認められた化合物については 4 試験のバリデーション・アッセイ(再確認試験)を行い、阻害活性を再確認しました。バリデーション・アッセイで約 50%以上の活性を有する化合物に対して IC₅₀ 測定(高価だが高精度な実験手法。阻害活性の有無の強い証拠となる)を実施し活性値を決定しました。

・ ヒット化合物の定義

IC₅₀ 測定において、10 μ M よりも良い阻害活性値を有すること。

・ 発見されたヒット化合物数

参加グループ数	応募化合物数 (重複含む)	プライマリ・アッセイの実施数	バリデーション・アッセイの実施数	ヒット化合物の数	ヒット率
11	4400	1993	68	13	0.65%

$$\text{※ヒット率} = (\text{ヒット化合物の数}) / (\text{プライマリ・アッセイの実施数})$$

得られたヒット化合物の詳細情報は、2015年7月17日開催の発表会・表彰式にて公表済み。

なお、第1回で発見された化合物や、それと強く類似しており容易に活性が予測される化合物は、第2回の出題における化合物ライブラリから除去しています。

(参考): 第1回コンテスト時 (2014年7月) 今回のヒットの基準を適用した場合

参加グループ数	応募化合物数 (重複含む)	プライマリ・アッセイの実施数	バリデーション・アッセイの実施数	ヒット化合物の数	ヒット率
10	1200	600	24	2	0.33%

【問い合わせ先】

特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ(IPAB)
Email: office@ipab.org, Tel: 03-5830-3819