

IPAB コンテスト：「コンピュータで薬のタネを創る」

報告書

平成 26 年 7 月 19 日
コンテスト運営委員長 関嶋政和

本コンテストにご協賛いただき誠にありがとうございます。7月17日に参加グループによる発表会と表彰式が成功裏に終了し、本事業が完了いたしましたのでご報告させていただきます。

本事業では標的蛋白質 (Human c-Yes Kinase) の酵素活性を強く阻害する化合物の探索をテーマにコンテストを企画いたしました。お陰様で 10 グループにご参加いただき、合計 600 化合物の阻害率測定実験を行い 7 つのヒット化合物を得ることができました。グループの内訳は、産業界から 3 グループ、アカデミアから 7 グループとなり、学生やポストドクターが主導するグループが半数を占めました。また、ふだん実験までは行うことのない IT 創薬の研究者や全くの素人を自称するグループもあり、結果として「伸びしろのあるグループ」から多くのご参加をいただきました。一方、IT 創薬分野で著名な独立行政法人 医薬基盤研究所の水口賢二氏のグループにもご参加いただけました。発表会は「伸びしろのあるグループ」とプロフェッショナルが同じ課題に対して一緒に議論できる貴重な機会となり、本事業の「IT 創薬分野の人財育成」という目的が効果的に果たされたと確信しています。加えて、Kinase の阻害剤として新規性のある化合物も得られたことから学術的にも意義のあるコンテストとなりました。参加グループや発見された化合物の詳細な情報は添付しております予稿集をご覧ください。この成果は論文としてまとめられ学術誌に投稿される予定です。

本事業の成果は皆様のご協賛なくして得られるものではありません。来年度にも継続を行っていかうと考えておりますので今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

2 ページ以降に発表会と表彰式の情報を記載いたしました。

第2回 IPAB セミナー

IPAB コンテスト「コンピュータで薬のタネを創る」発表会・表彰式

日時・場所

2014年7月17日（木）13:30-17:40

東京工業大学（大岡山）西8号館E棟10階大会議室

〒152-8550 目黒区大岡山2-12-1

参加費

無料（懇親会費：2,000円）

参加者数

57名

参考 URL

<http://www.ipab.org/eventschedule/contest>

<http://www.ipab.org/eventschedule/seminar/2014/0717>

プログラム

13:00 受付開始

13:30 - 13:35 開会挨拶

秋山 泰（IPAB 理事長）

13:35 - 13:40 コンテスト開催に当たって

関嶋政和（コンテスト運営委員長・IPAB 創薬情報 WG 主査・IPAB 理事）

13:40 - 13:50 コンテストのルール

千葉 峻太郎（コンテスト運営委員）

13:50 - 14:10 ターゲットと提出化合物の特徴

池田 和由（コンテスト審査委員・（株）レベルファイブ）

14:10 - 14:30 基調講演「タンパク質-リガンド間ドッキング 現状と今後の一考察」

本間 光貴（コンテスト審査委員・理化学研究所）

14:30 - 14:40 休憩

14:40 - 16:20 各チーム手法プレゼン

16:20 - 16:30 コンテスト総評

広川 貴次（コンテスト審査委員長・IPAB 理事）

16:30 - 16:50 表彰式

17:00 - 17:10 休憩

17:00 - 17:20 総合討論

17:40 閉会

18:00 懇親会

受賞情報

- グランプリ NEC 賞
 - 機械学習アルゴリズム RandomForest によるヒト c-Yes キナーゼ阻害剤のバーチャルスクリーニング
 - IMSBIO (グループ 6) : 株式会社情報数理バイオ
- グランプリ Nvidia 賞
 - Prioritization of YES kinase inhibitors using protein structure based pharmacophore models and enriched maximum common substructures
 - Mizuguchi Lab (グループ 10) : 独立行政法人医薬基盤研究所
- 健闘賞 ナミキ商事賞
 - タイトルなし
 - The Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University (Kitano Unit, OIST) (グループ 2) : 沖縄科学技術大学院大学
- 健闘賞 ナミキ商事賞
 - マルチプルテンプレートを用いたリガンド情報に基づくバーチャルスクリーニング
 - Chicken_George (グループ 5) : 名古屋大学
- 健闘賞 ナミキ商事賞
 - 機械学習法を用いた c-YES kinase 阻害剤探索
 - von (グループ 8) : 株式会社未来創薬研究所
- 健闘賞 ナミキ商事賞
 - Identification of novel c-yes kinase inhibitors
 - Gromiha-Velmurugan (グループ 9) : インド工科大学マドラス校
- 審査員特別賞 学生奨励賞
 - ゲーム機でバーチャルスクリーニングしてみた
 - inferist (グループ 3) : 東京大学
- 審査員特別賞 学生奨励賞
 - 拘束付き Docking による化合物探索
 - 東工大 TSUBAME グループ (グループ 7) : 東京工業大学

当日の写真



関嶋委員長の挨拶



参加グループの手法のプレゼン



質疑応答



グランプリグループと広川審査委員長



集合写真