



新学術領域「高速分子動画」Web セミナー

「構造生物学・化学・計算科学を融合させたウイルス・パンデミックに対する取り組み」

<要旨>

佐藤彰洋（横浜市立大学 データサイエンス研究科・教授）

「新型コロナウイルス感染症感染流行の数値シミュレーション基盤」

新型コロナウイルス感染症の感染者数の時間変化を数値的にシミュレーションする方法として確率的遅れ付き SIR モデル[1]による方法を紹介する。更に、このシミュレーション結果の配信を可能とするシミュレーション基盤とデータインフラストラクチャー基盤の構造と実装系[2]について説明する。

参考文献

[1] 佐藤彰洋, 新型コロナウイルス感染症抑止のためのデータ駆動型シミュレーションとデータの品質, 品質, Vol. 50, No. 4, pp. 292-299 (2020).

[2] 新型コロナシミュレーション基盤、<https://www.meshstats.org/covinfo/COVID-19/>

朴三用（横浜市立大学 生命医科学研究科・教授）

「インフルエンザウイルスに挑む」

人類はウイルスの世界的大流行を複数回経験しており、現在では新型コロナウイルス（COVID-19）によるパンミックが続いている。ウイルスの歴史は人類の歴史よりも長く、WHO によると、まだ発見されていないウイルスが約 170 万種存在し、このうち 85 万種は人間に感染できると推定されている。また、大流行の原因の一つは、地球温暖化及び生物の多様性や生態系の変化によるものと指摘している。そのような観点から今回、インフルエンザウイルスについて発表を行う。

野田岳志（京都大学 ウイルス・再生医科学研究所・教授）

「電子顕微鏡を用いた病原性ウイルスの増殖機構の解析」

我々の研究室ではインフルエンザウイルス、エボラウイルス、新型コロナウイルスなど、ヒトに対して病原性を示すウイルスに関する研究を行っている。本講演では様々な電子顕微鏡法を用いたウイルス増殖機構の解析例について紹介したい。

林良雄（東京薬科大学薬学部・教授）

「COVID-19 治療開発に向けたコロナウイルス 3CL プロテアーゼ阻害剤の創製研究」

2002 年の SARS 発生を機にその原因ウイルス（SARS-CoV）が有するシステインプロテアーゼ 3CL-Pro の阻害剤開発を進め、2013 年にアリアルケトン型阻害剤 YH-53 を創製した。この

阻害剤は、新型コロナウイルス感染症（COVID-19）に対する治療薬開発において、明確な作用機序を持つ優秀なリード化合物と思われる。講演では YH-53 の開発経緯と共に医薬品としての課題についてご紹介したい。

北尾彰朗（東京工業大学生命理工学院・教授）

「SARS-CoV-2 エンドリボヌクレアーゼのオリゴマー化阻害」

SARS-CoV-2 のゲノムには、ウイルス自身を構築するスパイクタンパク質などの Structural proteins とそれ以外の non-structural proteins (NSPs) がエンコードされている。後者の 1 つである NSP15 はエンドリボヌクレアーゼ活性を持ち、3 量体が 2 つ結合した 6 量体を形成している。分子シミュレーション等のアプローチによって NSP15 のオリゴマー化を阻害する可能性を調べた研究成果を発表する。

村上裕（名古屋大学 工学研究科・教授）

「新型コロナウイルスに対する迅速な人工抗体創製」

我々は、人工抗体を迅速に選択する *in vitro* 選択系を開発し、わずか 4 日間で SARS-CoV-2 に対する人工抗体の配列を得た ($K_D = 0.42 - 3.6$ nM)。さらに本抗体を用いて患者の鼻腔拭い液からのウイルスの濃縮に成功し、また、本抗体の高い中和活性 ($IC_{50} = 0.5$ nM) も明らかとした。本方法は、将来発生する感染症に迅速に対応できる基盤技術となると期待される。 *Sc. Adv.*, 2020.

重田育照（筑波大学計算科学研究センター・教授）

「Covid-19 関連タンパク質に関する計算ドラッグリポジショニング」

SARS-CoV-2 による新型コロナウイルス感染症（COVID-19）が報告されて以来、感染者数は世界で累計 1 億人を超え、その治療薬の開発は喫緊の課題となっている。新薬の開発には膨大な時間がかかることから、既存薬の転用（ドラッグリポジショニング）が有効であると考えられている。本研究では、その開発を加速するためさまざまな計算手法を駆使して、薬剤と Covid-19 関連タンパク質との結合様式を明らかにする計算科学的研究を紹介する。

以上