

国立研究開発法人 理化学研究所 COVID-19感染症への機動的な対応

理化学研究所におけるCOVID-19に対する対応



我々人類は今、新型コロナウイルスという見えない敵と対峙し、生存をかけて戦っています。理化学研究所はその叡智を結集して新型コロナウイルスを克服する術を人類にもたらし、特別プロジェクトを立ち上げました。

およそ百年前、我が国の繁栄の礎となるべく設立された理研は、自然科学におけるあらゆる分野で研究成果を積み重ねてきました。巨大な生命科学系プロジェクトを担うことで蓄積してきた、免疫学・遺伝学・構造生物学をはじめとした「知見」と、近年急速に発展している計算科学やAI、さらにそれを活かしたAI創薬などの多彩な「技術」を理研は有しています。これらを総動員し、本プロジェクトに注力する決意です。

人類はこれまで、科学技術を駆使して不可能を可能とし、多くの困難を乗り越えてきました。人類生存の危機に瀕した今、まさに科学技術の真価が問われています。理研は、国内外の研究機関や大学、企業とも力を合わせ、新型コロナウイルスの克服に貢献します。

2020年4月21日

理化学研究所理事長 松本紘



様々なニーズに迅速かつ機動的に応えていけるよう、より効率的な検出法の開発、効果的な治療薬開発のためのデータや施設等の供出、人々の生活や社会を持続させるための研究など、理化学研究所にしかない研究力・研究資源を最大限に活用した取組を推進。 <https://www.riken.jp/covid-19-rd/>

COVID-19研究 5つのアプローチ

トップダウン&ボトムアップのベストミックス

1. データの公開や先端大型共用施設の利活用による研究

- 富岳の優先的な試行的利用(20/04/07~)
- SPring-8/SACLAでの緊急課題募集 等

2. 検出法の開発

- SmartAmp法を用いた迅速検出法の開発
- 有用抗体探索とon-site診断キット実用化 等

3. 治療薬・ワクチン開発のための研究

- 創薬・医療技術基盤プログラム内特別プロジェクト
- SARS-CoV-2に対する化学合成ワクチンの開発 等

4. 生活や社会を持続させるための研究

- COVID-19関連ヘイトスピーチ・偽情報分析
- テレワークの影響の調査・改善策の検討 等

5. 基礎的な研究やその他の研究

- ヒト試料・感染細胞中のウイルス可視化技術
- 網羅的ゲノム解析&エピジェネティクス 等

※赤字は2019年度中に実施、乃至はその迅速な開始のため準備を実施した研究開発
2020/11/26時点で30課題をホームページ上で紹介
2020年度理事長裁量経費にて機動的に対応

○ 新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用



室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定

「富岳」を用いた新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測

パンデミック現象および対策のシミュレーション解析

新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算



スーパーコンピュータ「富岳」



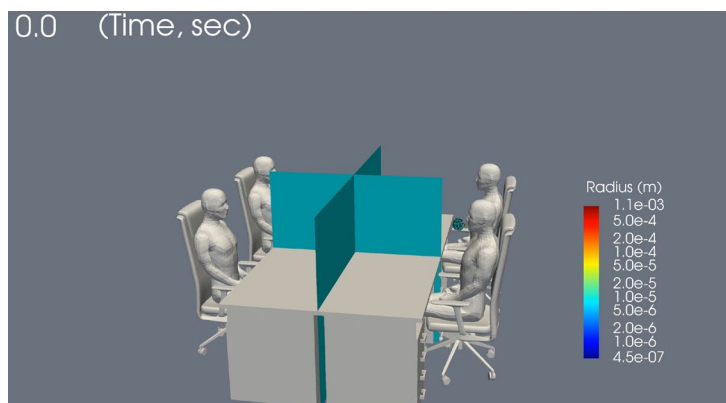
○ 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

理研が開発し「富岳」に実装を進めている超大規模熱流体解析ソフトCUBEを主に用いて、既存の飛沫計算では難しかった**高精度かつ大規模な系でのシミュレーションを実施。**

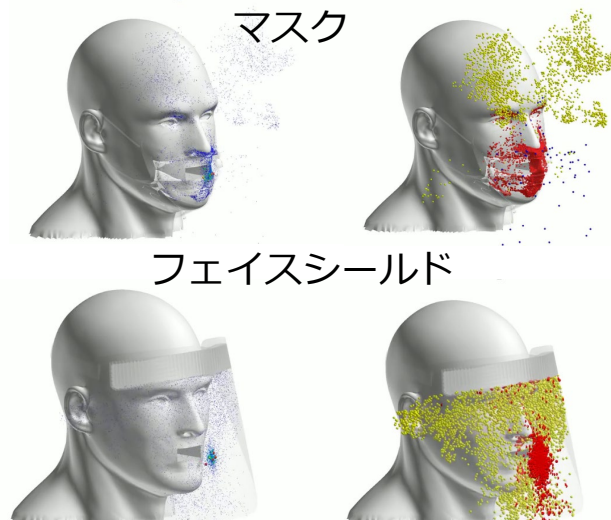
(理研、京都工芸繊維大、神戸大、大阪大、豊橋技科大、鹿島建設、大王製紙、DAIKINによる)

パーティション高さの影響

1.4mパーティションの効果



飛沫飛散抑制シミュレーション例



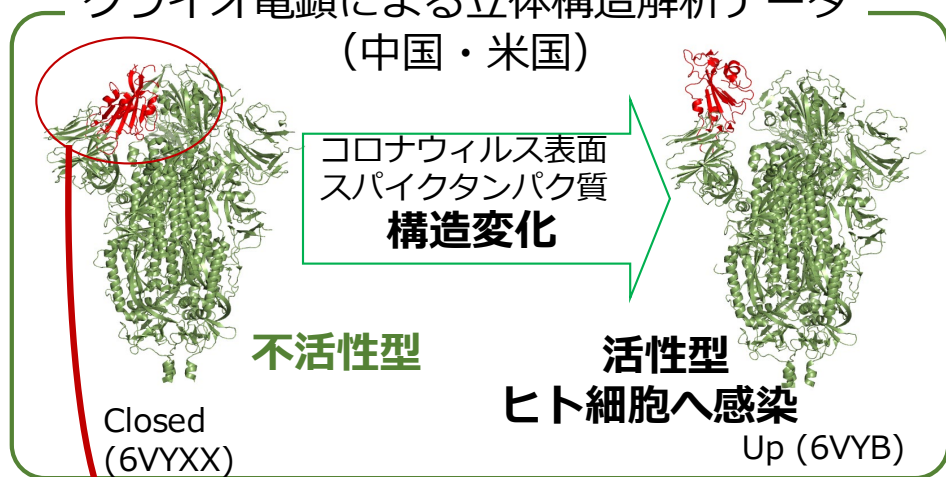
新型コロナウイルスの特性を考慮した飛沫の飛散シミュレーションを行い、様々な条件下での感染リスク評価を行った上で、空調、換気、パーティション等を活用した室内環境での**感染リスク低減対策の提案。**

https://www.riken.jp/pr/news/2020/20200826_1/index.html

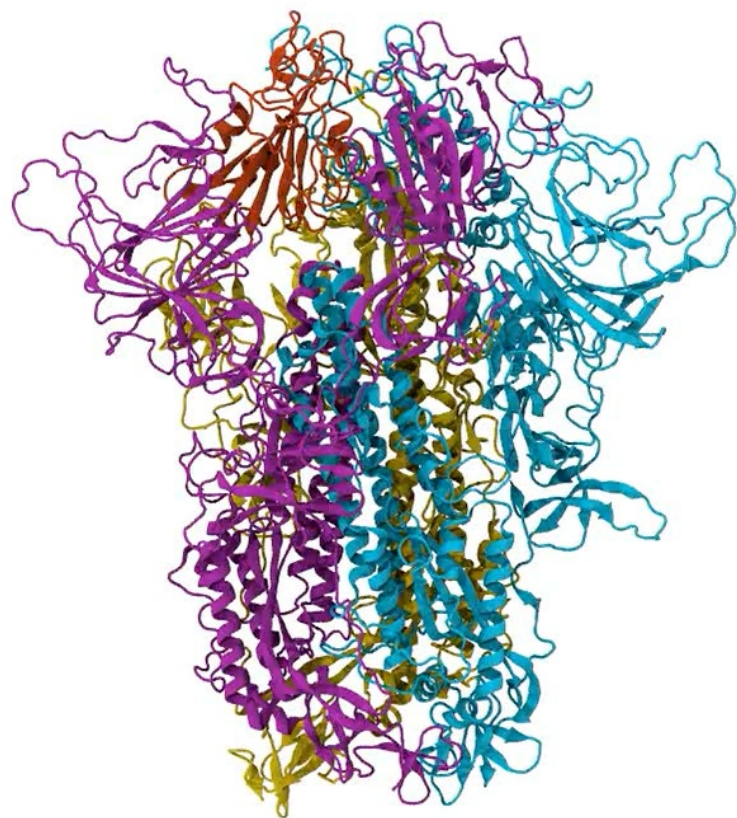
○ 新型コロナウイルス (SARS-CoV-2) メインプロテアーゼの分子動力学シミュレーションデータを公開

溶液中でのウィルスの活性化の構造変化を動的に予測、ウィルスの活性化を抑える薬剤の開発への貢献を期待

クライオ電顕による立体構造解析データ
(中国・米国)

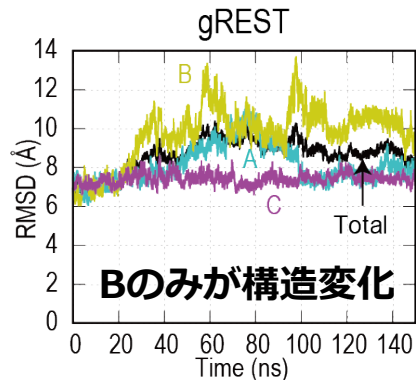


「富岳」を用いた分子動力学 (理研)



Closed (6VYXX)のみの構造情報を用いてRBD部分の分子運動を加速 (分子動力学)

理研が開発したソフトウェア
GENESIS
Generalized-ensemble simulation system



○ ウイルスタンパク質と治療薬候補化合物の相互作用データ公開

新型コロナウイルス（SARS-CoV-2）タンパク質と治療薬候補化合物の分子間相互作用を「フラグメント分子軌道法（FMO法）」で計算し、そのデータを、世界中の創薬研究者が自由に利用できる「FMOデータベース（FMO DB）」にて4月17日に公開、治療薬設計への貢献を期待

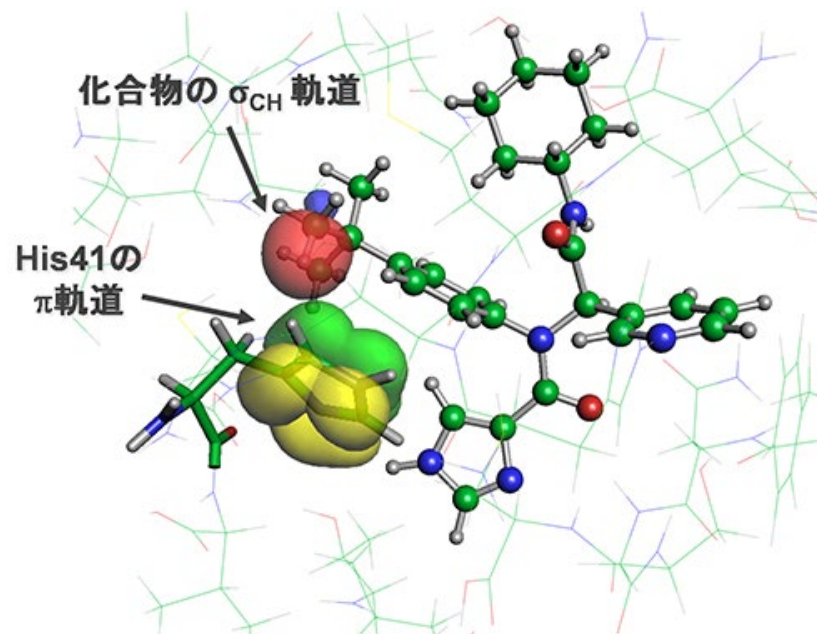
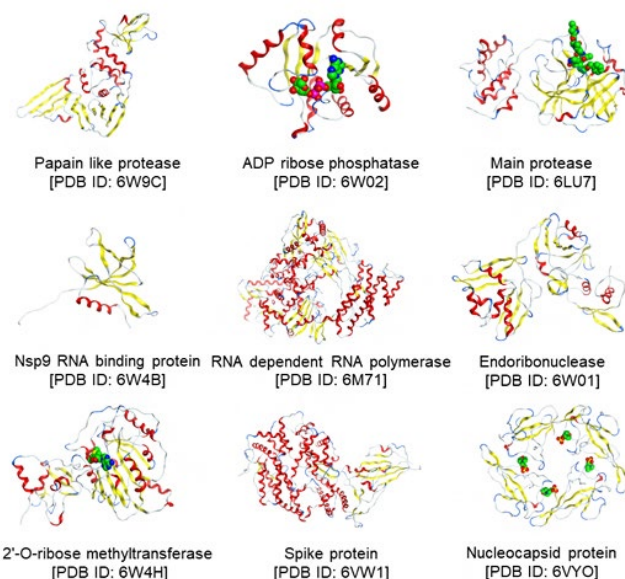
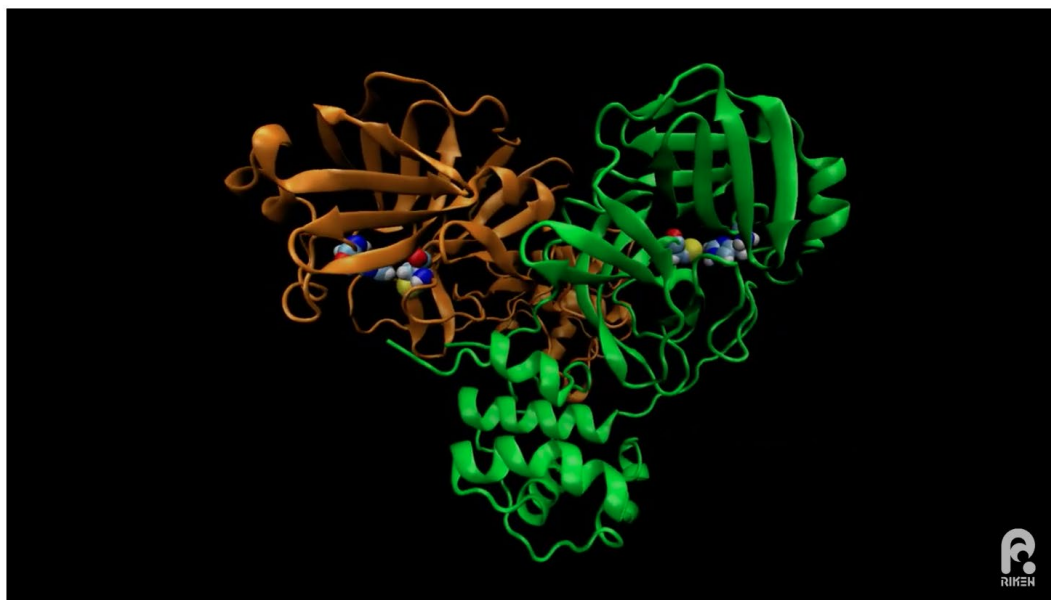


図1 FMO（フラグメント分子軌道法）計算を実施した9種のタンパク質の代表構造

図2 メインプロテアーゼと治療薬候補化合物がCH/ π 軌道相互作用を形成している様子

○ 新型コロナウイルス感染症の治療薬設計に役立つウイルスタンパク質と治療薬候補化合物の相互作用データの公開

新型コロナウイルスメインプロテアーゼの10マイクロ秒間（1マイクロ秒は100万分の1秒）にわたる構造動態を、分子動力学（MD）シミュレーション専用計算機「MDGRAPE-4A」を用いてシミュレート



世界の創薬研究者が自由に利用できるよう、RAW DATAをリポジトリ *Mendeley Data* に3月17日公開

検出法の開発

- SmartAmp法を用いた迅速検出法の開発
- 新型コロナウイルスの非増幅・高感度・迅速診断技術の開発
- 新型コロナウイルス抗体の検出系の開発
- 新型コロナウイルス検出用抗体の単離とオンサイト迅速ウイルス検出キットの開発

治療薬・ワクチン開発のための研究

- COVID-19 特別プロジェクトの開始
- 新型コロナウイルス抗体製剤の開発
- 剛性解析による新型コロナウイルスタンパク質の分析
- 新型コロナウイルスに対する化学合成ワクチンの開発
- ビタミンD3アジュバントを用いた簡易ワクチン開発
- 新型コロナウイルス感染症治療薬候補化合物の大規模データベーススクリーニング

生活や社会を持続させるための研究

- 新型コロナウイルス感染症に関するヘイトスピーチ・偽情報の分析
- オンライン初診におけるELSIと対応策の抽出
- テレワークが人間に与える影響の調査・改善策の検討
- 長期の診療報酬データ（レセプトデータ）を用いた新型肺炎患者の重症化の予測 等

基礎的な研究やその他の研究

- ウイルスのライフサイクルを可視化するための技術開発
- 日本で流行している新型コロナウイルスの解析
- 新型コロナウイルス関連学術知識探索支援システムの開発
- エピジェネティクスに基づく新型コロナウイルスの解析 等

**研究力・研究資源を最大限に活用し、感染症の理解から克服に資する、
With- / Post-COVID-19 社会へ貢献する研究活動を着実に実施。**