

# Institute for Chemical Reaction Design and Discovery (WPI-ICReDD) Aug 10, 2023

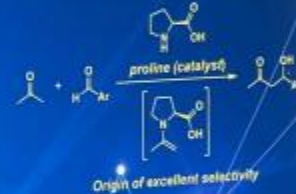
資料2-3  
科学技術・学術審議会  
基礎研究振興部会（第12回）  
令和5年8月10日

The Nobel Prize in Chemistry 2021  
for the Development of Asymmetric Organocatalysis

2021年ノーベル化学賞受賞



Nobel Prize Winner  
Professor Benjamin List  
ICReDD Principal Investigator



**ICReDD**  
Institute for Chemical Reaction Design and Discovery  
HOKKAIDO UNIVERSITY

WPI-ICReDD拠点長・前田 理

化学反応創成研  
Institute for Chemical Reaction Des  
(ICReDD)



## 2 化学反応の重要性



安価な原料

化学反応



有用な材料や薬剤

- ◆ その世界経済に対する貢献は、年間約60兆円にも上る
- ◆ 新たな化学反応の開発は人類社会にとって著しく重要であるにもかかわらず、その開発には非常に長い時間がかかる
- ◆ 化学反応を効率よく開発する手法の確立が急務である



### 3 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)

ICReDDが掲げるスローガン「**化学反応の設計と発見を革新する**」



我々が目指す、計算科学、情報科学、実験科学を融合した化学反応開発

#### ■ 化学反応設計手法の革新 ■

コンピュータを用いた化学反応設計の高速化

#### ■ 分子活性化技術の革新 ■

上記の手法を応用し、廃棄物などの安定な化合物を有用な材料に変える、新たな分子活性化反応を開発する

ICReDDは以下を成し得る化学反応設計法の構築を目指します！

- ◆ 複雑な化学反応の開発期間を大幅に短縮させる（例えば、100年かかる開発を数年に）
- ◆ 従来のやり方では100年かけても見つからない、人知の及ばない化学反応の発見を導く

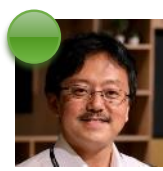


# 4 拠点メンバー

## アドバイザリボード

TROPSHA, A. USA  
 HIMO, F. Sweden  
 MASERAS, F. Spain  
 CRUDDEN, C. M. Canada

YAMAMOTO, H. Japan  
 SAKAKI, S. Japan  
 MINATO, S. Japan



Vice Director  
ITO



Director  
MAEDA



Admin.  
Director  
ISHIMORI



Exec.  
Advisor  
IJIRO



Res. Admin.  
Director  
YAMAMOTO



Human  
Resources  
Edu. & Develop.  
Chief MITA



Human  
Resources  
Edu. & Develop.  
TAKAHASHI



Fusion Res.  
Coordinator  
HARABUCHI

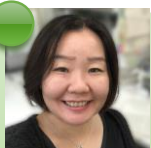


PR  
STECKER

- 計算科学
- 情報科学
- 実験科学
- マネジメント



LIST



OGAWA



GONG



Y. HASEGAWA



TAKETSUGU



RUBINSTEIN



Co-PI  
TSUJI



INOKUMA



TANAKA



Junior-PI  
HUANG



Junior-PI  
JIN



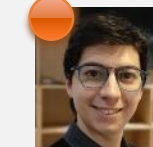
Co-PI  
YAMAMOTO



Junior-PI  
GAO



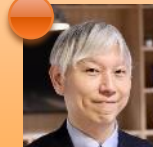
VARNEK



Co-PI  
STAUB



KOMATSUZAKI



YOSHIOKA



TAKIGAWA



IWATA



Junior-PI  
SIDOROV

2023年6月現在：  
 研究者総勢81名  
 内、外国人35名（43%）  
 女性14名（17%）

59%

20%

21%



WANG HAYASHI IDE ISSHIKI HIGASHIGA FAN WANG IMAJO NAGATA AKIYAMA MUKAIMINE ONO SUZUKI AKAMA LYALIN CLEMENT HU TSITSVERO NATH



NAGYHÁZI DEBBARMA WANG RAUT LAMA JAISWAL ZHENG FERDOUS MIKHERDOV WANG SARTYOUNGKUL CHANDU MANGAONKAR OZEN LI ICHINO ZANKOV GANTZER MATSUMURA



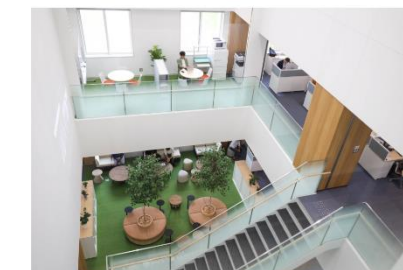
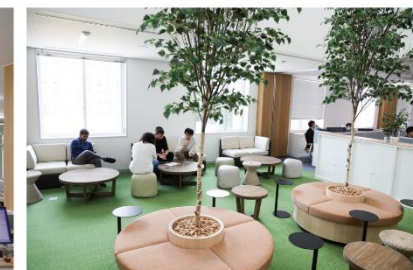
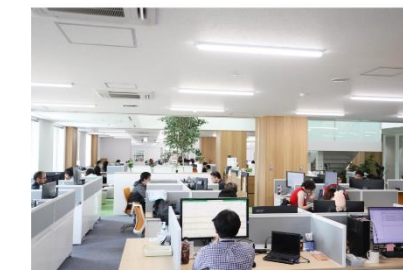
KATSUYAMA SERAPHIM KUBO KITAGAWA KUBOTA NAKAJIMA YONEDA TSUDA SHIMIZU MUKAI SATO URAGUCHI SAWAMURA HASEGAWA IWASA KOBAYASHI TAKAHASHI MIZUNO TABATA

ICReDD Fellow



# 5 WPI-ICReDD新棟（2023年3月完成）

- ▶ 4階建て、床面積5,500m<sup>2</sup>
- ▶ 融合を促進するフュージョンリサーチオフィス（Super Mix Lab）
- ▶ 産学連携ラボエリア
- ▶ オープンスペースとラウンジエリア
- ▶ エネルギー消費量に関するZEB Ready規格を満たす設計



# 6 WPI-ICReDDの研究戦略

## 複雑さの階層

### 複雑・夾雑系

共有結合、非共有結合、超分子間相互作用などの多様な相互作用が介在する反応

### 巨大分子系

共有結合のみではなく、非共有結合が反応性を支配する反応

### 小分子系

共有結合組換えが支配的な反応

## Flagship projects for FY2023

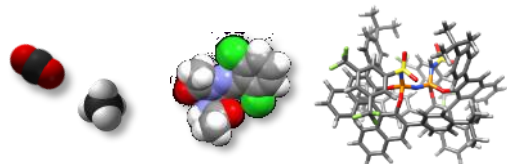
- VI. 新素材や新計測技術を活用したがん診断
- V. 高分子の物性・生成過程・劣化過程の解明と制御
- IV. メカノケミカル合成の探求
- III. スクリーニングによる触媒の設計と発見
- II. ゼロからの新化学反応発見
- I. 計算科学・情報科学ツールの開発



# 7 WPI-ICReDDの研究戦略

## 実験をベースとする応用研究

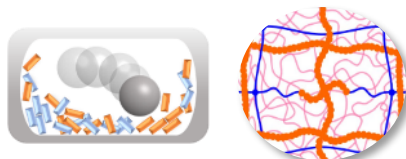
### 新分子合成法の設計と発見



#### Project II+III

- 化学反応設計法の革新
- II. 計算によるゼロからの反応設計
- III. 情報・ロボットによる触媒設計

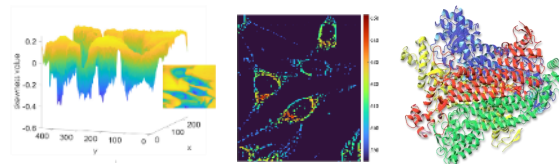
### 新材料の設計と発見



#### Project IV+V

- メカノケミストリーの革新:
- IV. メカノケミカル合成の深化
- V. 機能性ゲル材料の創出

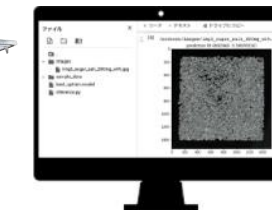
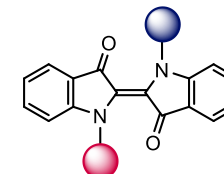
### 革新的計測・診断法の開発



#### Project VI

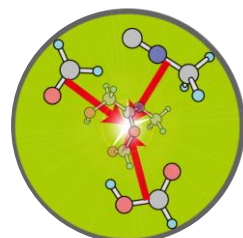
- ガン診断技術の革新:
- VI. ガン細胞をガン幹細胞へと導く
- HARP現象の理解と活用

## Bottom-up Projects

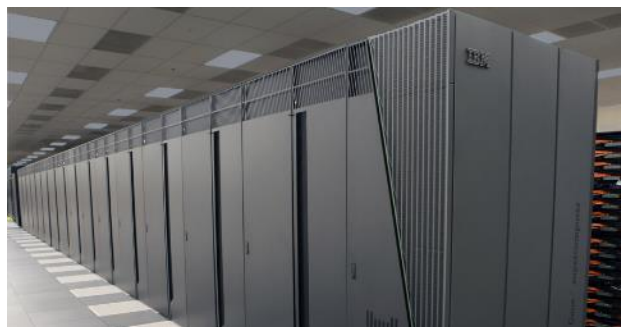


## Project I

化学反応を合理的に設計するための計算科学・情報科学ツールの開発



AFIR



Database

設計法を提供

フィードバック

# 8 WPI-ICReDDの研究戦略

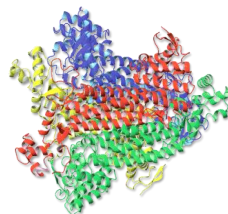
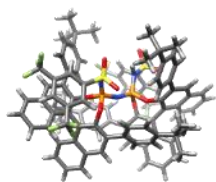
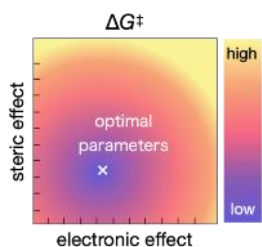
ボトムアッププロジェクトへのスタートアップ資金提供によって  
若手研究者からのアイデア創出をサポートし、研究を持続的に発展させる

## Flagship Projects

Project I

Project III

Project V

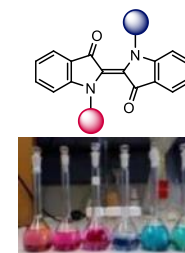
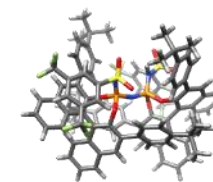
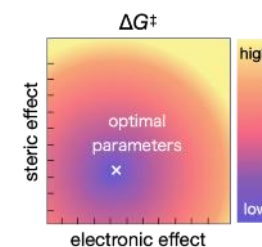


## Next Flagship Projects

Project I

Project III

Project A



年次評価により有望課題を促進

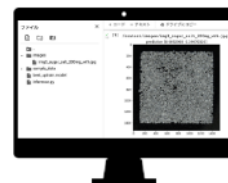
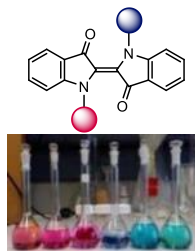


## Bottom-up Research

Project A

Project B

Project C

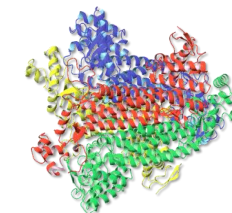
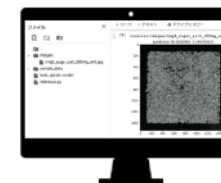


## Next Bottom-up Research

Project B

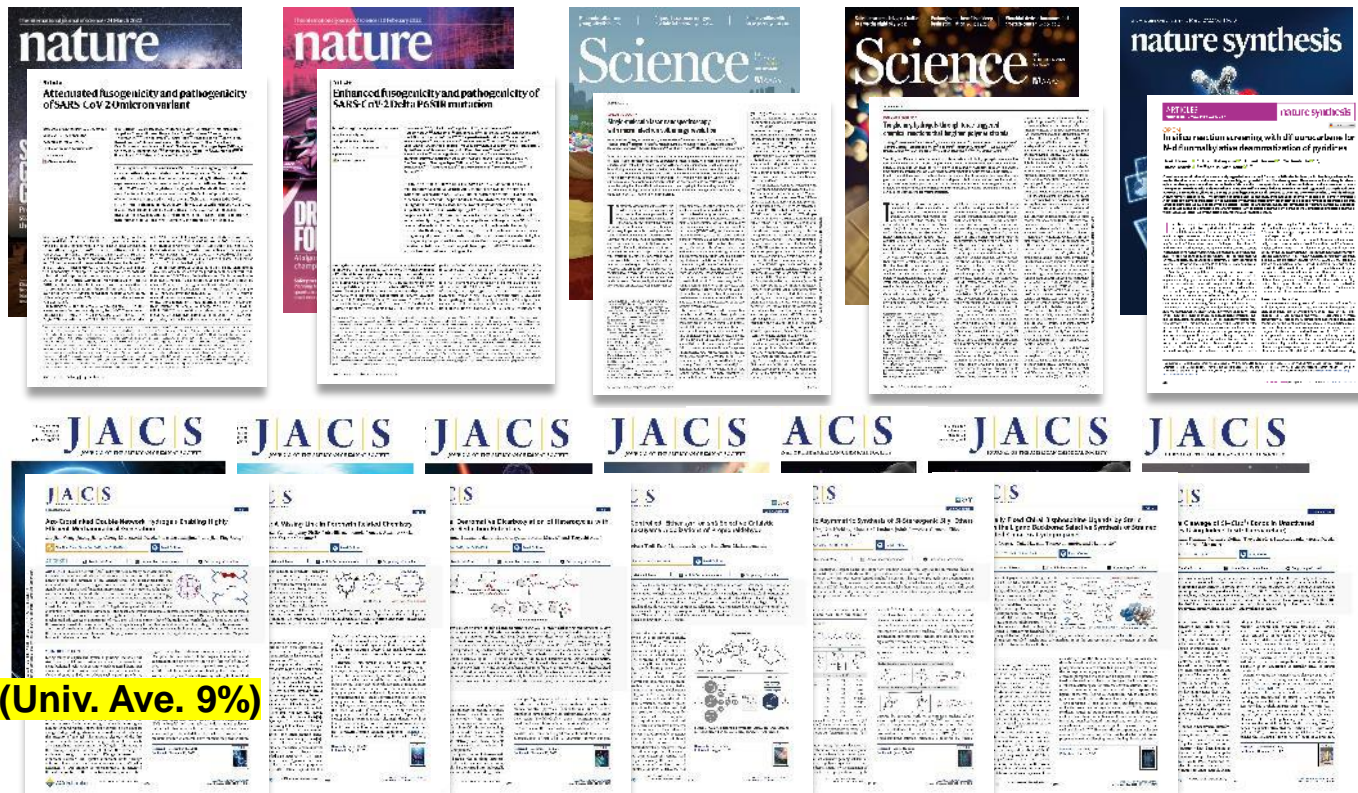
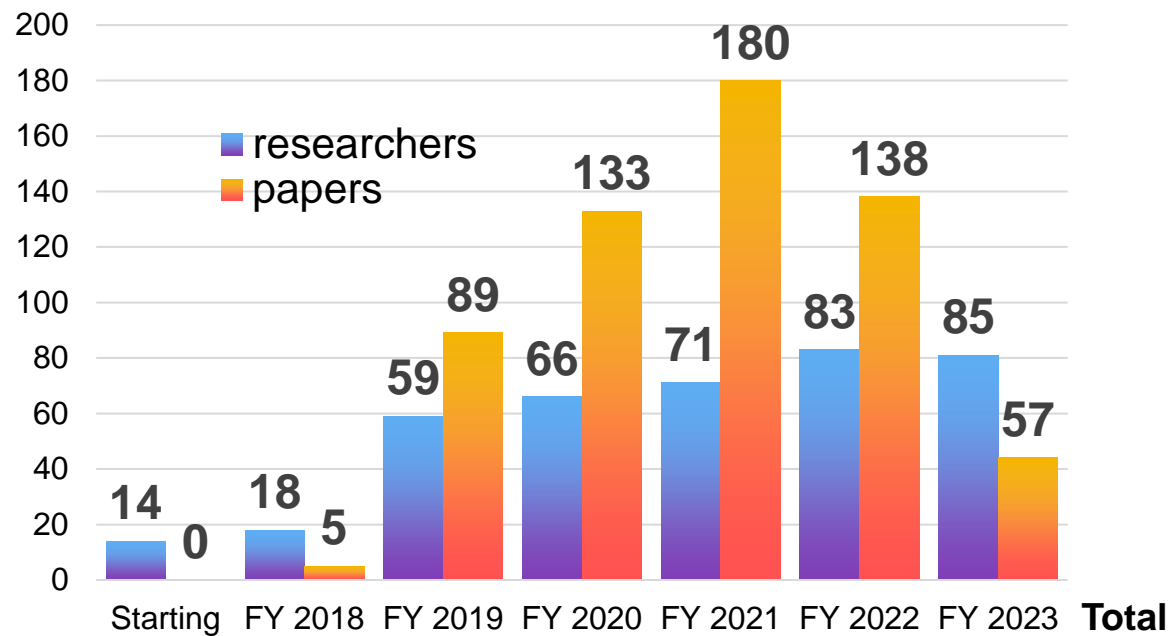
Project C

Project V





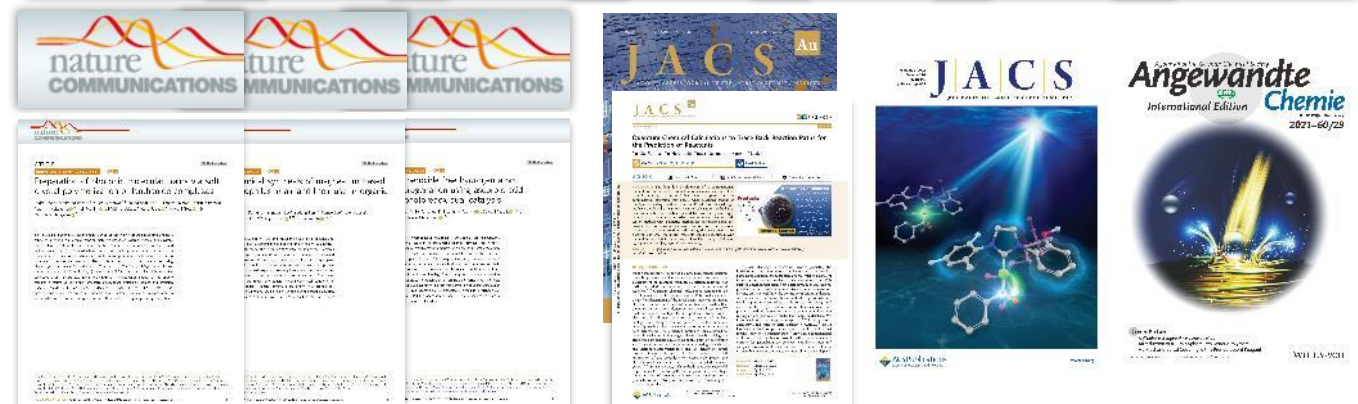
# 9 論文出版状況：数とインパクト



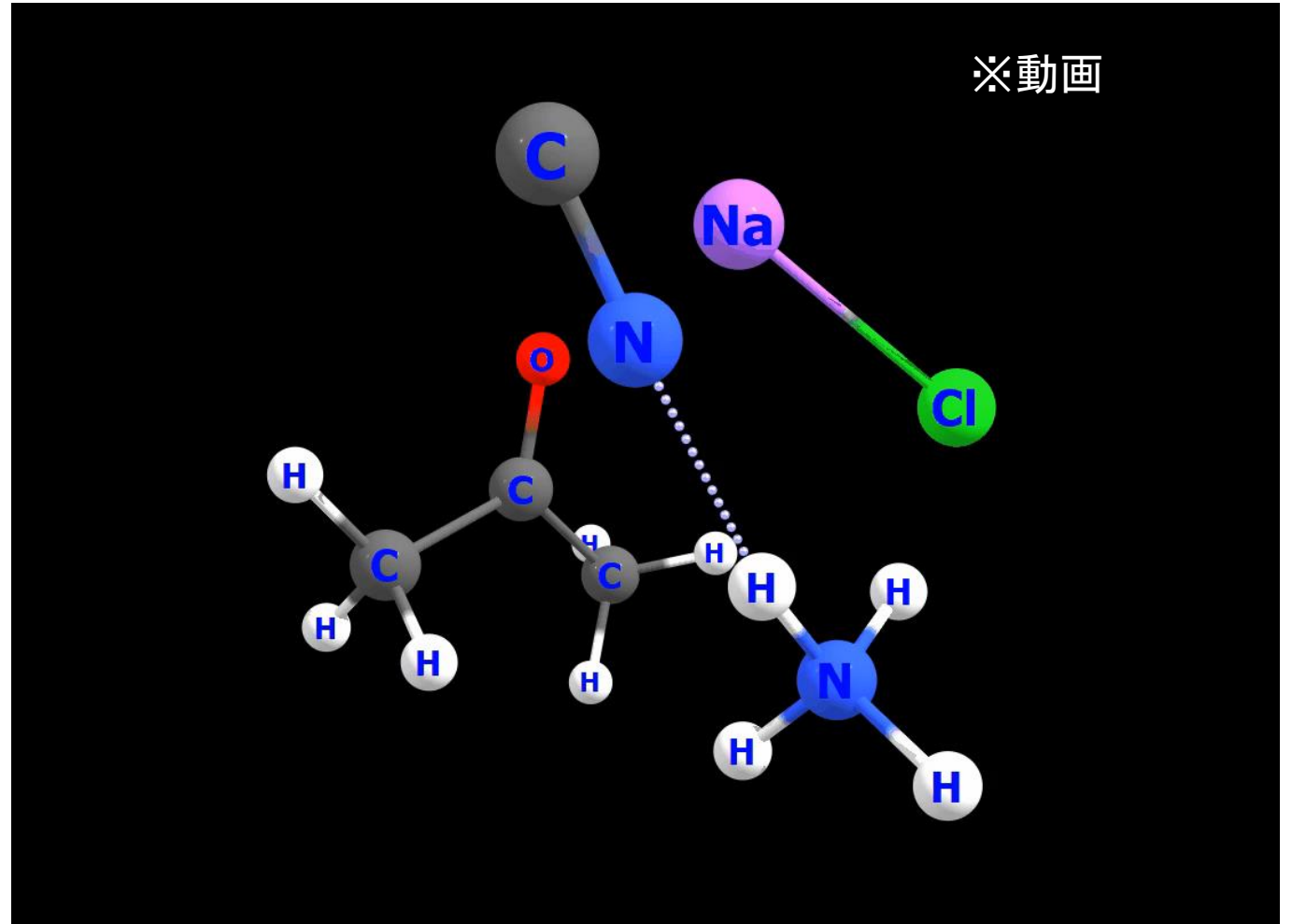
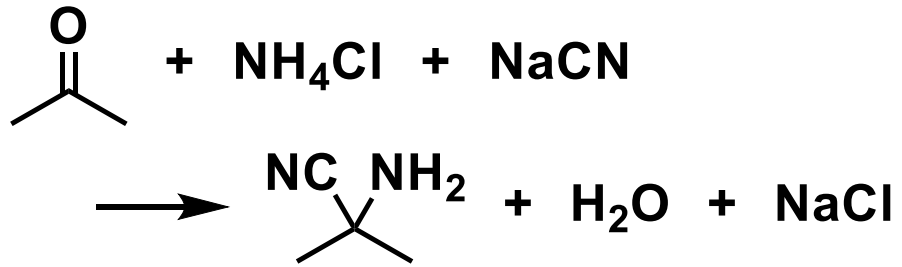
**Total**  
16% (Univ. Ave. 9%)

	Starting	FY 2018	FY 2019	FY 2020	FY 2021	FY 2022	FY 2023	Total
%Top10%	40%	17%	19%	16%	18%	0%	16% (Univ. Ave. 9%)	
%International Collaboration	40%	38%	23%	36%	28%	26%	31%	

**Total papers: 602 (as of July 2023)**



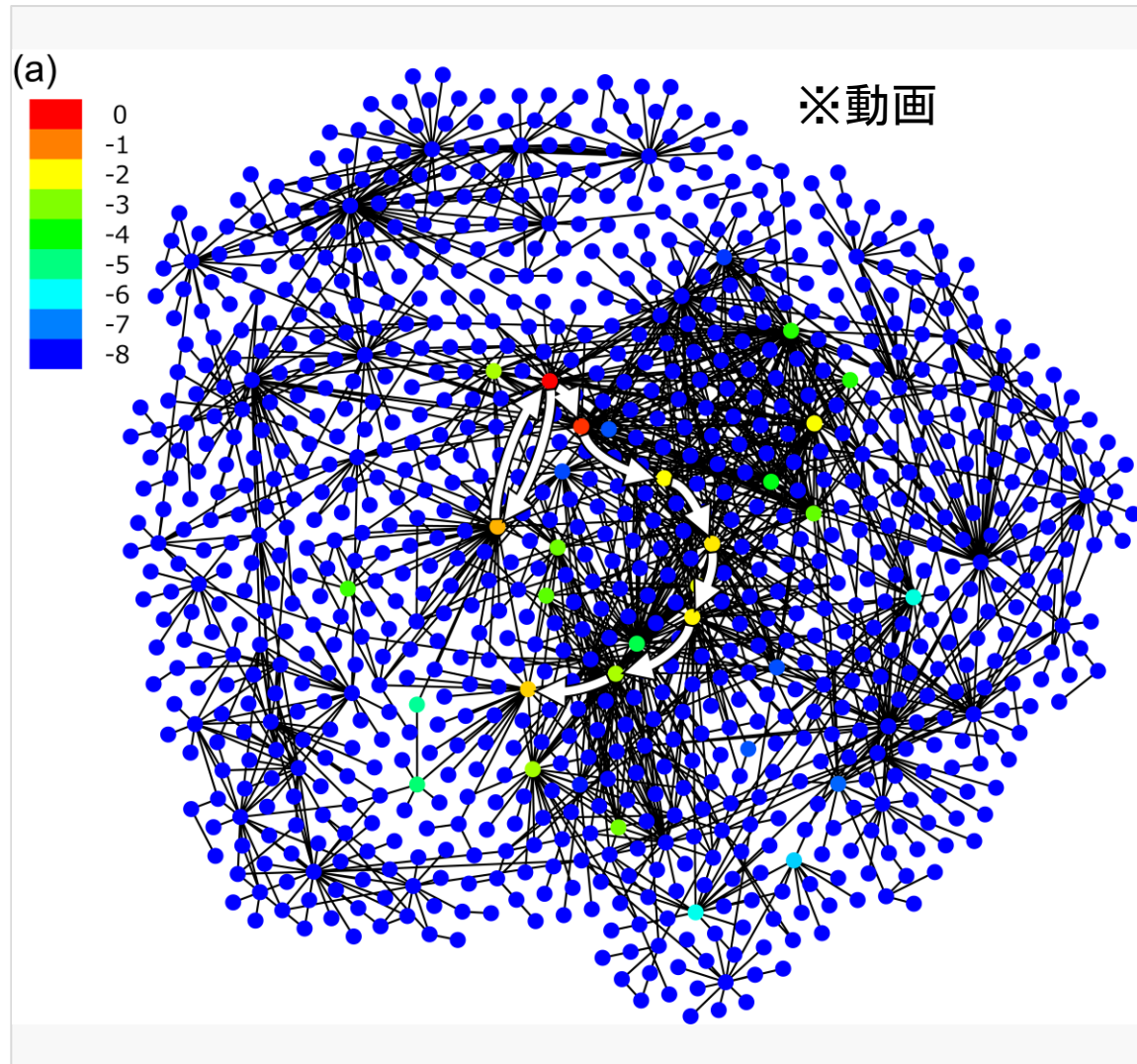
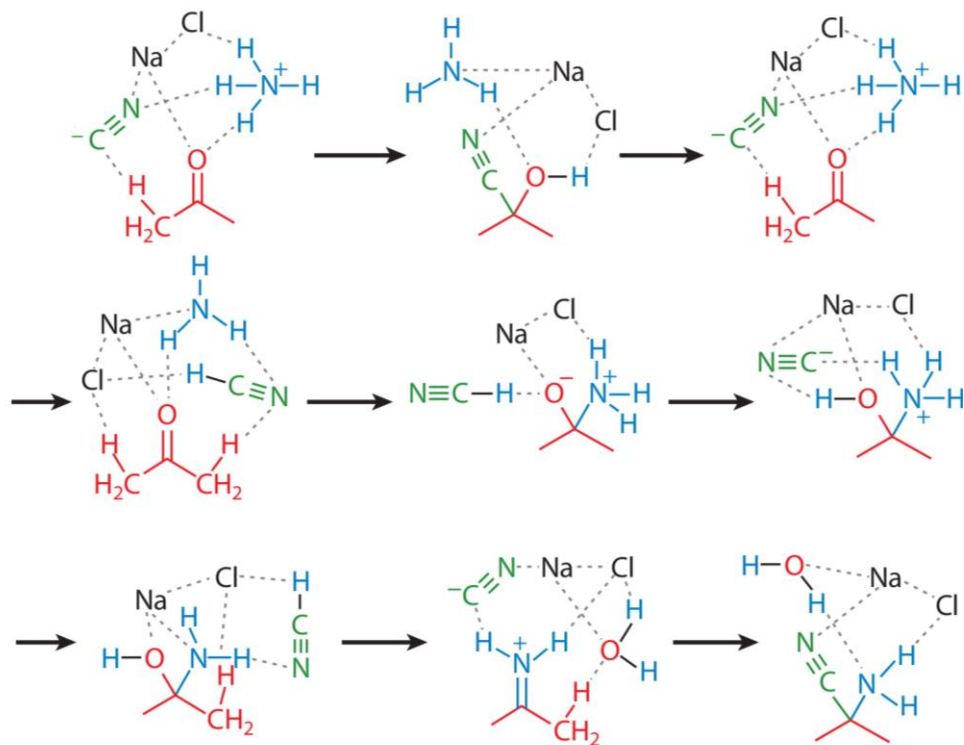
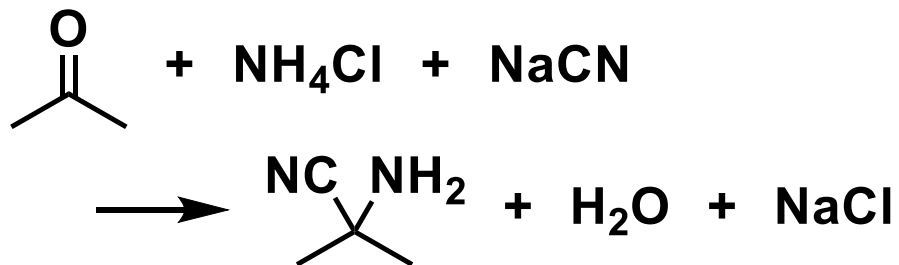
# 10 計算によって何ができるのか？



量子化学計算により化学反応を可視化し、理解できる



# 11 化学反応を予測する計算法（独自技術）



ゼロから化学反応を予測する汎用的な計算法の開発に、世界に先駆けて成功

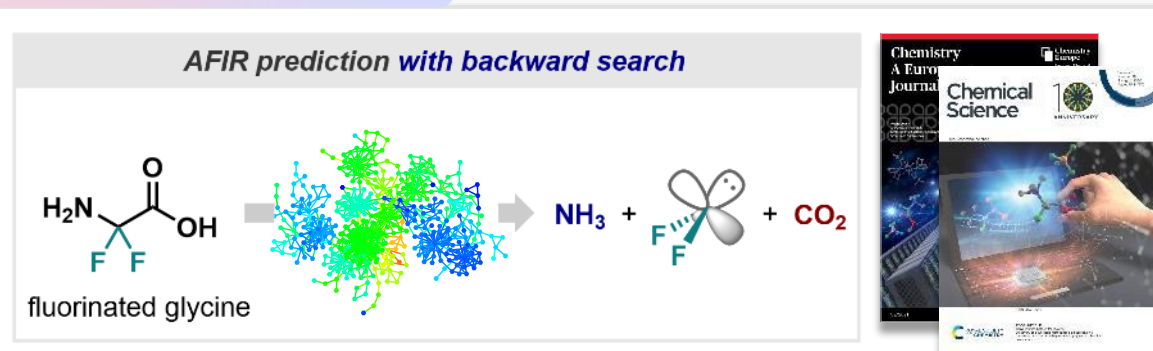
# 12 予測に基づく反応開発 (Project II)



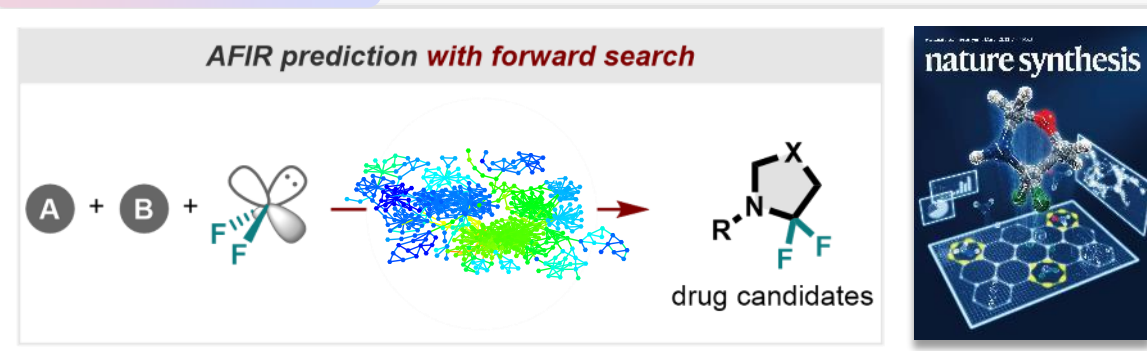
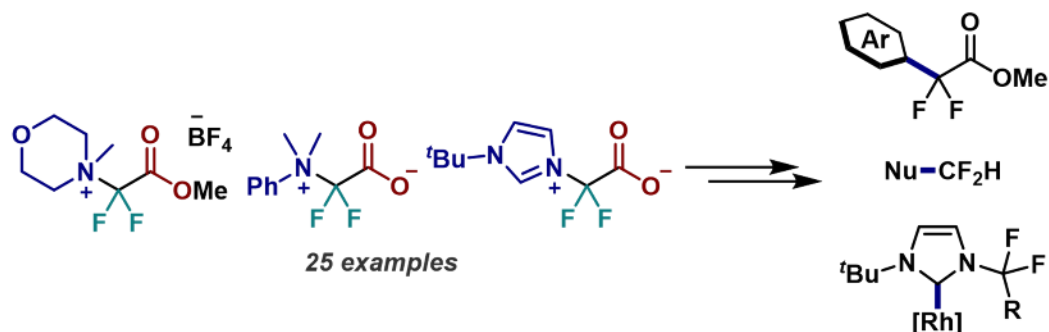
1) 2か月で実現

◆ 量子化学的逆合成解析に基づく反応設計と展開

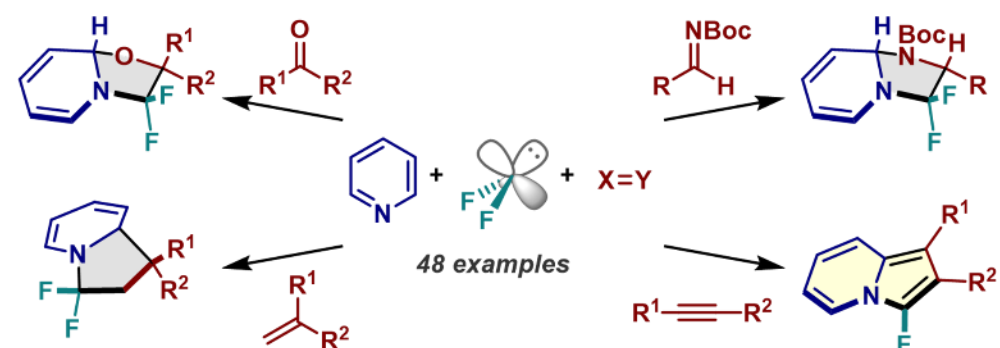
2) 1年間で実現



薬剤候補の分子骨格の合成



様々な分子へと展開可能



予測計算に基づき、短期間での新規反応開発を実現



# 13 化学反応予測AIへ (Project I)

計算

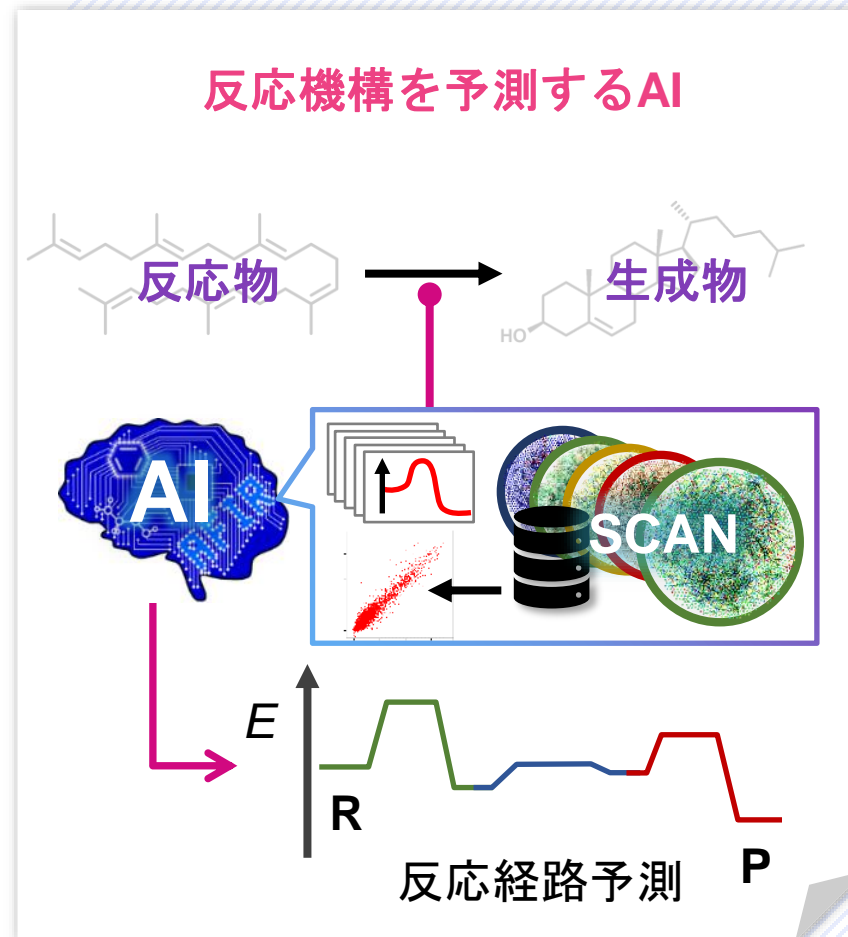
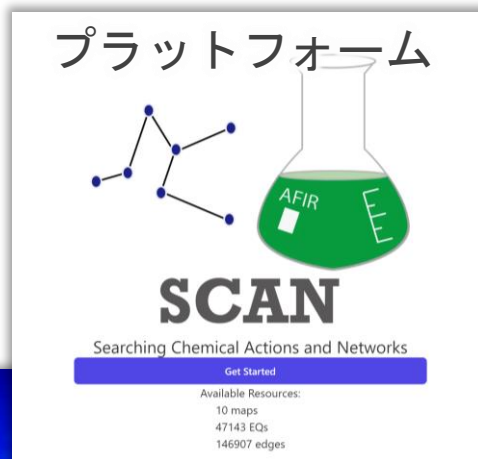
AFIR データベース (SCAN) → Reactivity prediction AI



MAEDA

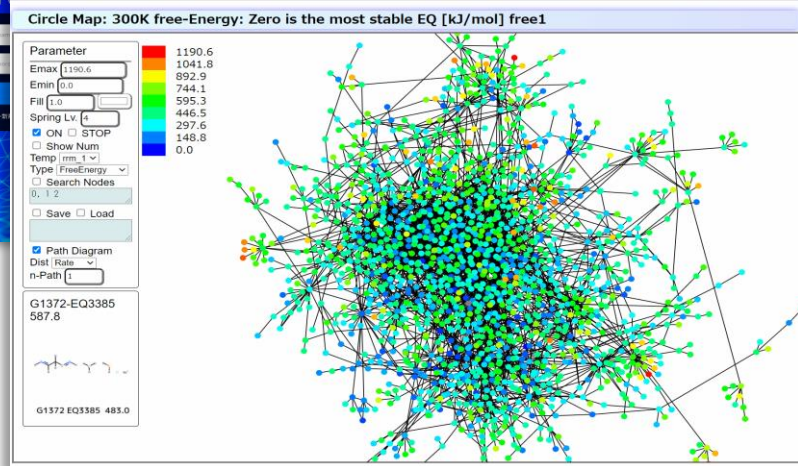


HARABUCHI



```
EQ90 -78.6 [H]C(=O)C([H])([H])[H]. [H]OC([H])=O
C 3.49562851976700 1.57452565003500 -2.09152462975300
C 1.94871866150200 -1.08039666294700 -0.72949243344100
C 1.33977218512200 -1.72786776186700 0.47560313713700
C 3.9843835265900 2.36163844089300 2.68402618080100
H 2.54189864708400 -0.202418680016400 -0.46113281384500
H 2.57279029811200 -1.81754735008900 -1.25424258697900
H 0.72079103358800 -2.62884095789600 0.28885378097600
O 1.14771261778800 -0.80265042028900 -1.42910714831400
H 1.47195734795600 -1.34426041797900 1.62723714754600
O 2.81282815524700 0.75331821616200 2.88724923779700
H 2.36988916530600 0.04068097632100 2.35478135590800
O 3.5837636068500 1.49091401217800 0.88307402411100
12
G1 EQ197 -68.8 [H]OC([H])([H])([H])OC([H])=O
C 3.06389313303800 -1.11251572922600 -0.63358489937000
C 2.95697720526600 0.80457929347500 0.82985217720600
C 2.64172007437000 0.13665381322400 2.17049814090400
C 3.70706920888800 -1.57731377848300 -1.39224695218900
C 3.65061142250800 1.63641503604100 0.96743206015300
H 2.03898462339800 1.16629679053200 0.35572250583000
H 2.62023033872700 0.92013706885700 2.93607699695800
C 3.46121322545100 -0.55396954292400 2.49256326110000
O 1.37784607035700 -0.49403163348800 2.23357578393600
H 1.96840671475900 -1.53911821117400 -0.32531654840200
O 1.29637654902900 -1.07765464595100 1.45616859662400
C 3.67235090492800 -0.04131081537300 -0.12668283428000
12
G2 EQ67 -62.5 [H]C1([H])OC(=O)C1([H])[H]. [H]O[H]
C 3.57992387825900 -0.33009038732300 0.12578072416400
C 3.07971804952900 1.08282447985700 0.41902056298000
C 2.58061804683000 -0.46658309695300 1.73603723484900
C 1.48076652151600 -2.06081390428700 1.32242120233800
C 3.87408177708000 1.82979081830800 0.49611336506800
H 2.30955942594900 1.42894275211400 -0.27504759430500
H 1.50035776329400 0.39485181945100 1.86708245495000
H 3.07757129782100 0.79642061212000 2.64978790773300
C 3.11923514148100 -0.84961820930300 1.32178644776800
O 0.50907203530200 -2.03415967412100 1.37858404612500
O 0.20489239914400 -2.93781284356400 1.21076905830400
O 4.15341977742900 -0.91340240857500 -0.74519552322600
12
G3 EQ81 -61.9 [H]OC([H])([H])C([H])([H])C([H])=O
C 4.15623714228900 0.46630656513000 0.35217072425900
C 2.82773122423700 -0.17382931060100 0.04252053221000
C 2.12985212816400 -0.75899821646300 1.26856294663600
H 4.75352981314800 0.78850136029600 -0.52582071313100
H 2.17706226847000 0.58683351153100 -0.41544234856200
H 2.97704390102900 -0.94864145833300 -0.72304125192200
H 2.75492517077200 -1.55171092470000 1.71461320247500
H 0.39117240053800 -1.52481140851900 1.62953164203300
O 0.90606472209300 -1.28340278723500 0.63249855015000
```

可視化・解析



実験データに基づく反応予測システムの課題を抜本的に改善し得る

# 14 機械学習により適用限界を突破



Co-PI  
STAUB



GANTZER



HARABUCHI



MAEDA



VARNEK



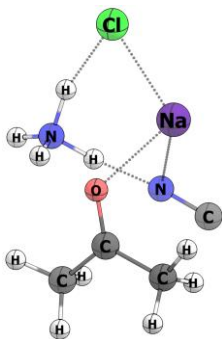
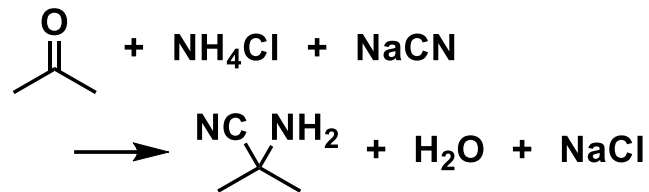
Junior-PI  
GAO



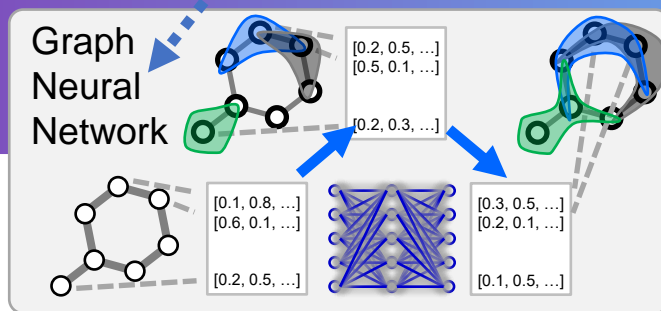
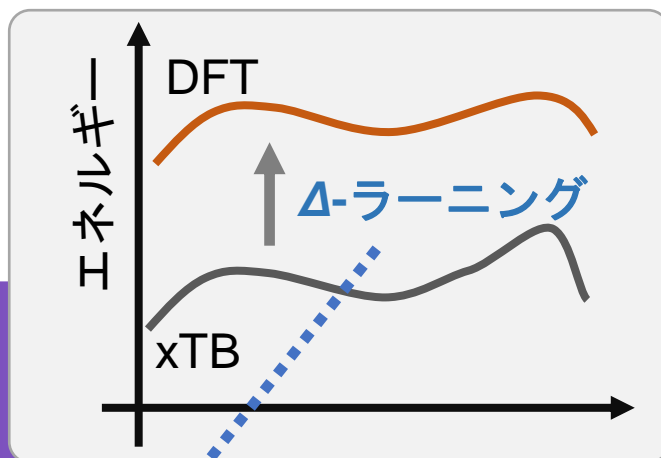
Co-PI  
TSUJI



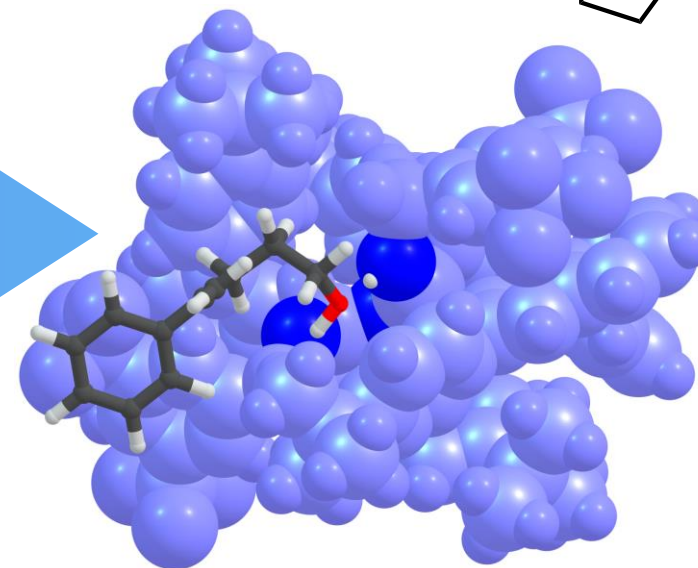
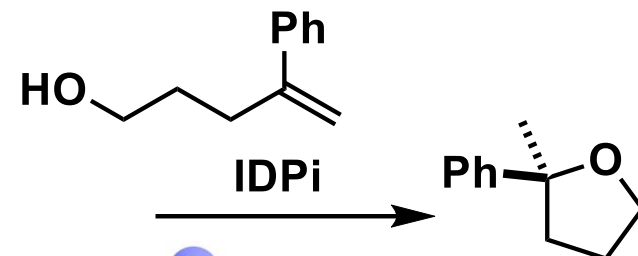
LIST



19 原子



機械学習ポテンシャル



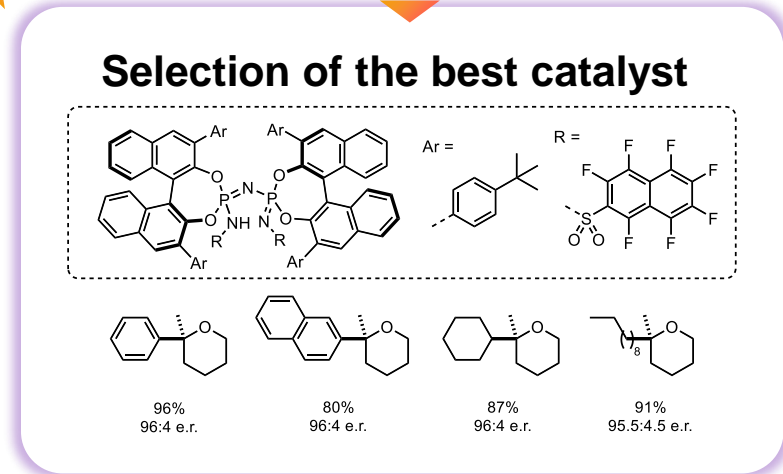
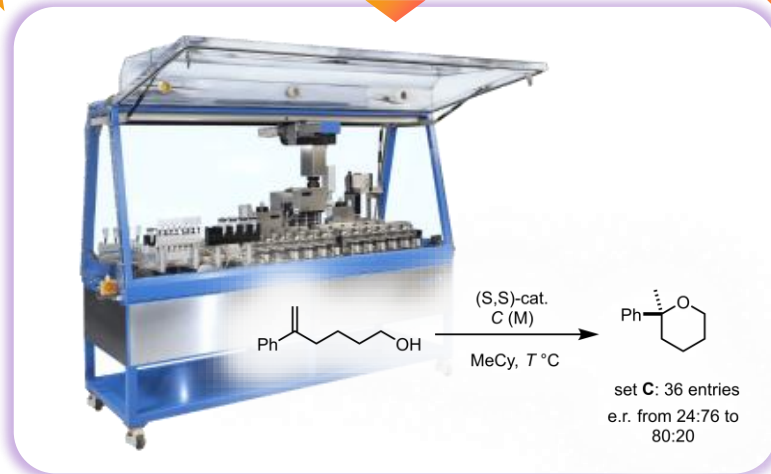
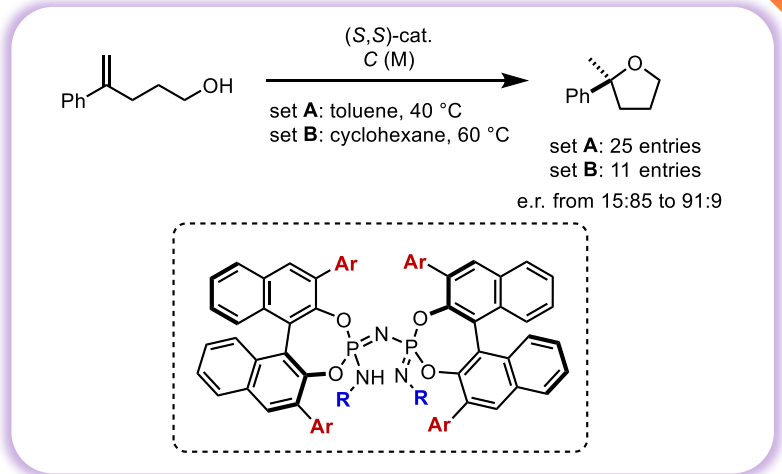
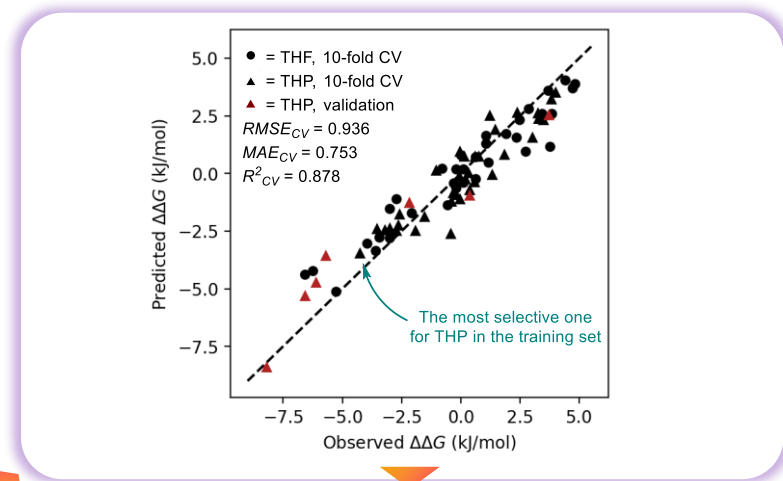
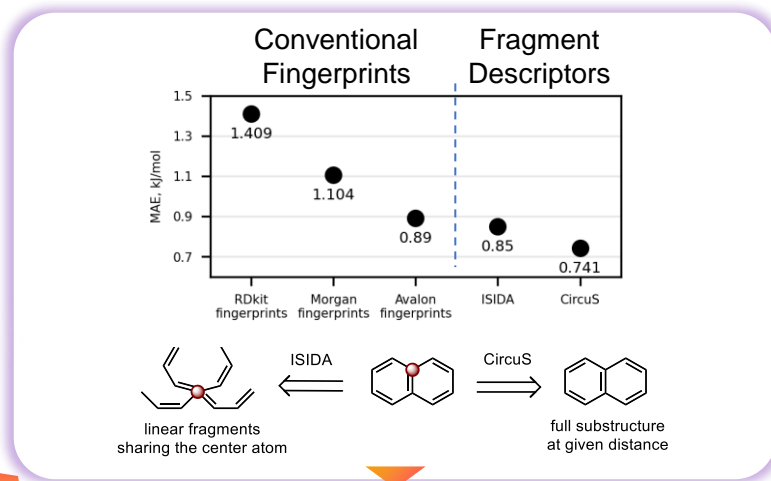
228 原子

融合研究により、巨大な分子触媒を含む化学反応に対する応用が実現



# 15 有機分子触媒の設計 (Project III)

◆ 情報科学とロボット合成を活用し、新規触媒の情報科学的な設計に成功



# 16 メカノケミカル合成の探求 (Project IV)



ITO

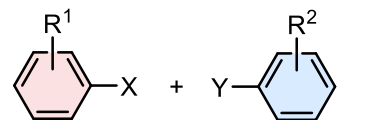


KUBOTA

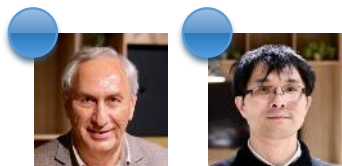
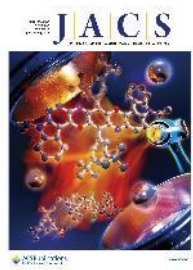
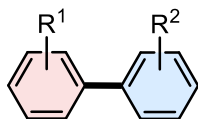


- ✓ 新しいタイプの化学反応
- ✓ 環境負荷が少ない

## ◆ Solid-state cross-coupling chemistry



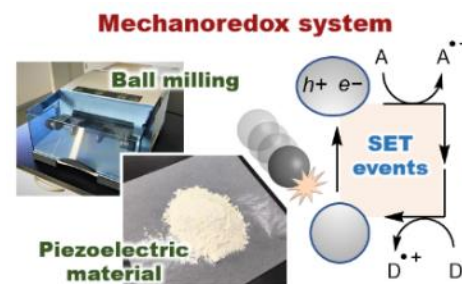
Pd catalyst  
base  
solid-state  
ball milling



RUBINSTEIN YAMAMOTO

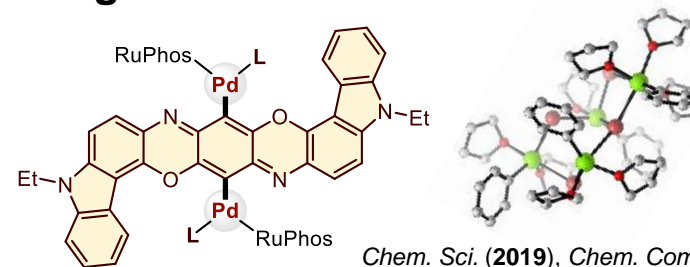
*Nature Commun.* (2019), *Chem. Sci.* (2019), *Chem. Eur.* (2019)  
*J. Am. Chem. Soc.* (2020), *ACS Sustainable Chem. Eng.* (2020)  
*J. Am. Chem. Soc.* (2021), *ACS Catal.* (2021), *ChemSusChem* (2022)  
*Chem. Sci.* (2022), *Synlett* (2022)

## ◆ Mechano-redox reactions using piezoelectricity



*Science* (2019), *Angew. Chem. Int. Ed.* (2020)

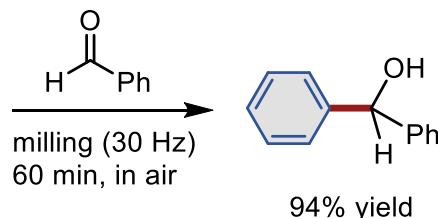
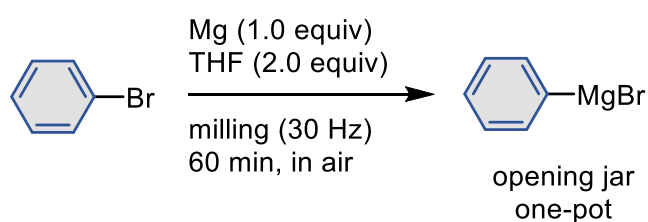
## ◆ Organometallic mechanochemistry



MAEDA JIANG

*Chem. Sci.* (2019), *Chem. Commun.* (2020), *Nature Commun.* (2021)

## ◆ Mechanochemical synthesis of paste-like Grignard reagents



*Nat. Commun.* 2021, 12, 6691.

nature > nature communications > collection

Collection | 29 March 2022

### 2021 Top 25 Chemistry and Materials Sciences Articles

We are pleased to share with you the 25 most downloaded *Nature Communications* articles\* in chemistry and materials sciences published in 2021. Featuring authors from around the world, these papers highlight valuable research from an international community.

Browse all Top 25 subject area collections [here](#).

**No. 1**  
the most accessed article  
in *Nat. Commun.*



# 17 ゲル材料の理解と制御 (Project V)



GONG



NAKAJIMA



ZHENG



MAEDA



JIANG

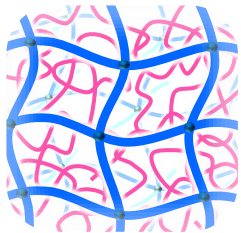


RUBINSTEIN



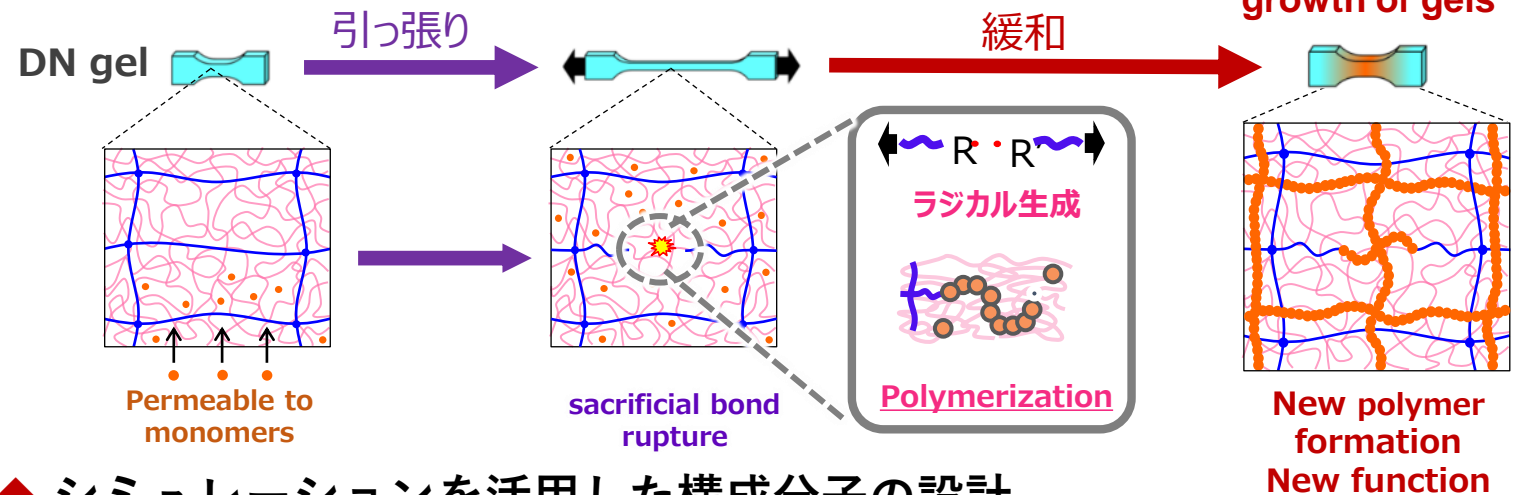
YAMAMOTO

## ◆ 筋肉様の機能を持つゲル材料

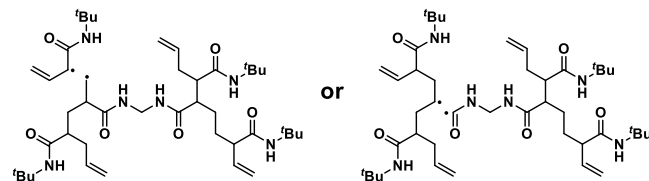


Matsuda, T.; Kawakami, R.; Namba, R.; Nakajima, K.; Gong, J. P.  
*Science* **2019**, 363, 504-508.

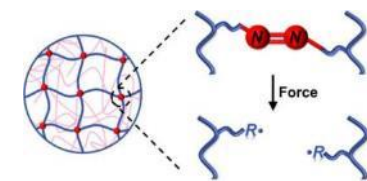
## ◆ 筋肉のような機能の発現メカニズム



## ◆ シミュレーションを活用した構成分子の設計



Force level: ~3210 piconewton



Force level: ~1670 piconewton

Wang, Z. J.; Jiang, J.; Mu, Q.; Maeda, S.; Nakajima, T.; Gong, J. P.  
*J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 3154-3161.

# 18 HARP現象によるガン診断 (Project VI)



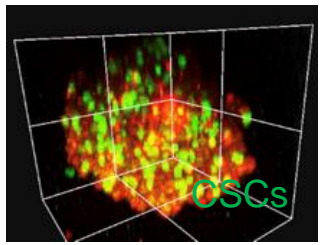
nature biomedical engineering ARTICLES

Rapid reprogramming of tumour cells into cancer stem cells on double-network hydrogels

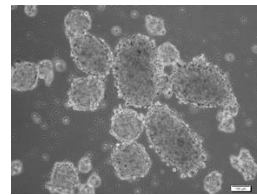
Jun Suzuki<sup>1,2,3</sup>, Masami Tsuda<sup>1,2,3</sup>, Lei Wang<sup>1,2,3</sup>, Shoji Kohsaka<sup>4</sup>, Karin Kishida<sup>5</sup>, Shinya Semba<sup>6</sup>, Hirokazu Sugino<sup>7</sup>, Sachiko Aburatani<sup>8</sup>, Martin Fraitoh<sup>9,10</sup>, Takayuki Karakawa<sup>4</sup>, Shinya Kojima<sup>4</sup>, Toshihide Ikeno<sup>11</sup>, Yoshihiro Ohmura<sup>12</sup>, Hiroyuki Mano<sup>13</sup>, Kazuo Tanaka<sup>14</sup>, Jun Ping Gong<sup>15,16</sup> and Shinya Tanaka<sup>1,17</sup>

Cancer recurrence can arise owing to stem circulating cancer stem cells (CSCs) that are resistant to chemotherapy and radiotherapy. Here, we show that a double-network hydrogel can rapidly reprogramme differentiated cancer cells into CSCs. Spheroids expressing selected genes of the stemness gene set, H1, H2 and H3, were formed within 24 h of seeding the gel with cells from any of the human cancer cell lines or with cancer cells recruited from patients with glioblastoma. Human brain cancer cells cultured on the double-network hydrogel and intracranially injected in immunodeficient mice led to higher tumorigenicity than brain cancer cells cultured on single-network gels. We show here that the stemness network led instead to the gradual neural growth factor secretion, and that lactate channel expression and the protein composition were essential for the formation of protein spheroids. Our gel-based CSCs from primary brain cancer cells were characterized by an increased number of protein spheroids. Our gel-based CSCs from primary brain cancer cells were characterized by an increased number of protein spheroids. Our gel-based CSCs from primary brain cancer cells were characterized by an increased number of protein spheroids.

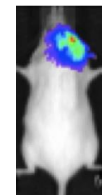
DNゲル状でのガン幹細胞の誘導



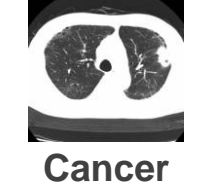
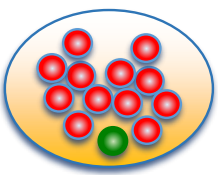
スフェロイド形成



in vivo 腫瘍形成

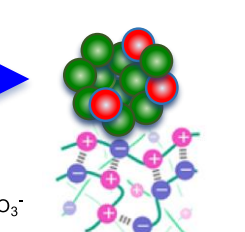


ガン細胞



Cancer

ガン幹細胞



on Hydrogel

HARP現象

(hydrogel activated reprogramming)

薬剤 薬剤



Drug screening

治癒

**Diagnosis Pancreatic cancer**

38 cases (2021.4-2022.6)

**Raman microscope**

**Raman Spectrum**

KOMATSUZAKI CLEMENT

**Hyperspectral Cube**

cyt c region is highly up-regulated

**Mean Spectra**

Intensity [a.u.]

**Patent: Gel kit**

射出成型金型製作 (Outsourcing)

Japan Number : 2021-151208  
Date: 2021.9.16  
Title: Cell culture device and methods

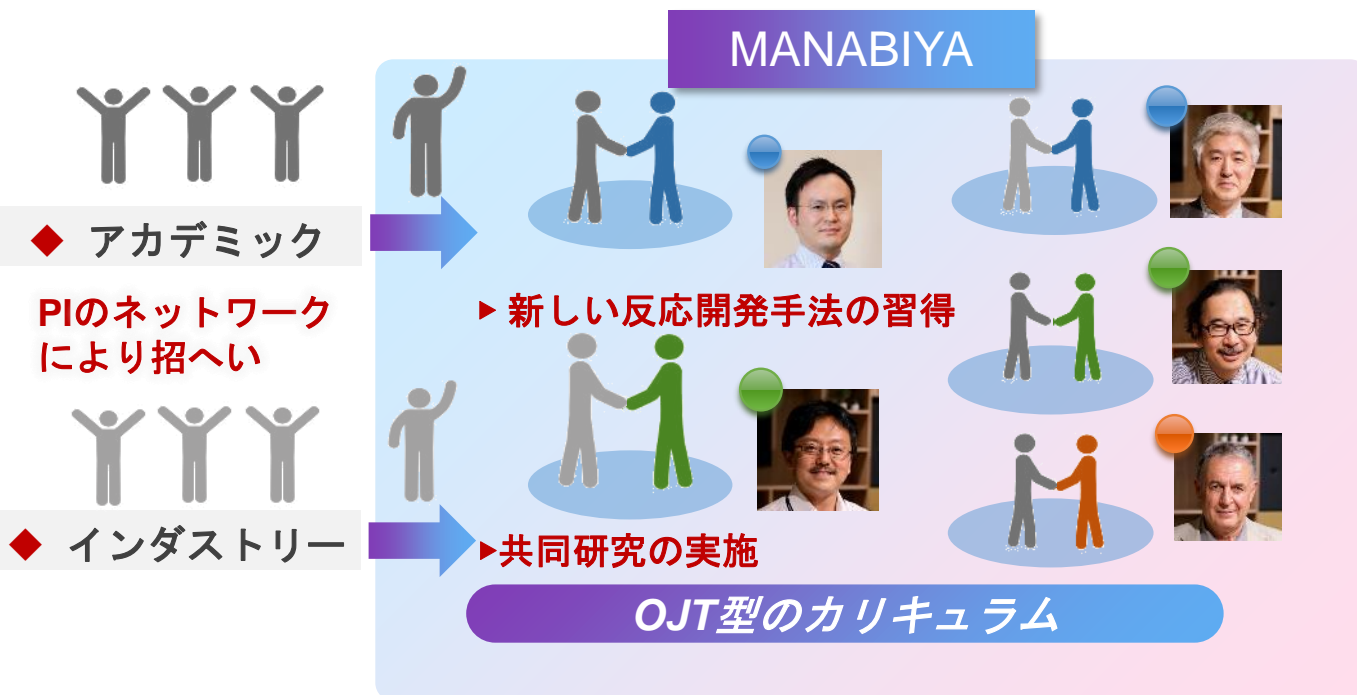
特許① DNゲル...

Tanaka, S; Gong, J. P, et al. Nat. Biomed. Eng. 2021, 5, 914.; Patent: Japan/USA

HARP現象に基づくガン幹細胞の迅速診断技術でガン幹細胞を根絶し、再発しないガン治療へ



# 19 国際化と企業連携へ向けた取り組み①



ICReDDによる化学反応設計法、新反応、新材料、診断・計測技術などを世界に広める！

アカデミック

- ◆ 共同研究の実施
- ◆ 若手研究者の育成

インダストリー

- ◆ 企業との共同研究の実施

大型共同研究プロジェクトへ

## MANABIYAコース



16 コース



MANABIYA  
修了証

- ◆ 各PIによるMANABIYA コース

- ◆ 2020年度

MANABIYA アカデミック

採択/応募: 7/22 (国内/国外 採択 : 5/2; 応募 : 5/17)

MANABIYA インダストリー (7 件)

- ◆ 2021年度

MANABIYA アカデミック

採択/応募: 7/12 (国内/国外 採択 : 3/4; 応募 : 3/9)

MANABIYA インダストリー (6 件)

- ◆ 2022年度

MANABIYA アカデミック

採択/応募: 13/17 (国内/国外 採択 : 10/3; 応募 : 12/5)

MANABIYA インダストリー (3 件)

# 20 国際化と企業連携へ向けた取り組み②

## ・総長のトップダウンで先端的融合研究を実施・機動性の高い研究組織設置過程

**有機触媒 × デジタルトランスフォーメーション (DX)** による次世代有機触媒の開発を推進

本学の最先端の研究成果をてこに、学内外の研究者や企業との共同研究を強力に推進して本学の研究力や国際的認知度を向上させる新たな駆動力とするための融合研究プラットフォームを構築する

【本事業におけるKPI】

- ・国際共著論文 10報/年
- ・受託・共同研究受入数 3件/年
- ・国際研究集会開催数 1件/年

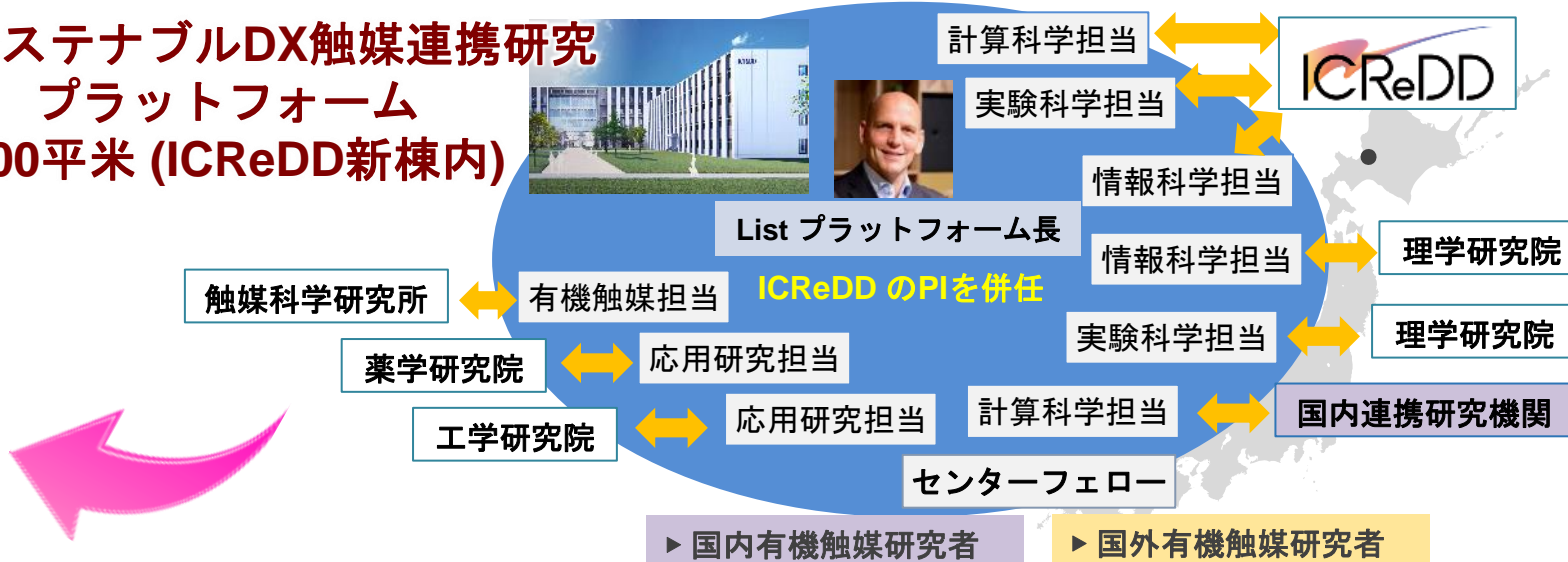
**国際研究交流拠点構築**  
 →国内外の有機触媒研究者の参画  
 →アジア圏での研究交流ハブ構築  
 →定期的な国際シンポジウムの開催  
 →共同研究者・中短期留学生の受け入れシステム

**人材育成・交流**      **研究開発**

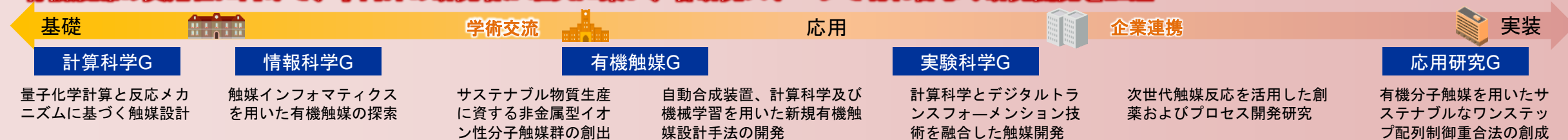
**有機触媒×デジタル**の求心力を「てこ」に人材交流のアジアハブを構築

低環境負荷の次世代材料開発のほか、医療系ビッグデータを活用し、ナノ創薬デリバリーシステムや新興感染症対策などにも活用

### List サステナブルDX触媒連携研究プラットフォーム 200平米 (ICReDD新棟内)



### 有機触媒の実用化に向けて、学内外の研究者が北大に集い、各研究ステージで切れ目なく研究開発を加速





# 21 新棟を活用した企業連携

## ▶ 複雑系化学反応を対象としたコンピューティング反応経路設計技術の革新

計算科学、情報科学、実験科学の融合によって革新的な化学反応を設計し、高機能材料の開発や循環型社会の実現に資する新規反応設計を共同で行う。

2023年4月1日—2028年3月31日 (5年間)

- ① 高機能材料の開発
- ② 循環型社会の実現に資する新規反応の設計
- ③ 計算科学，情報科学の新規技術開発



×



三井化学



# 22 アカデミアでのAIインフラ構築の課題

## 化学反応を収率付きでゼロから予測する技術

→大規模な化学反応計算トレーニングセットの構築→化学反応予測ツール

**AlphaFold:** GoogleのDeepMind社が開発した、大規模なトレーニングセットの機械学習に基づくタンパクの折畳み構造予測ツール

### Article

## Improved protein structure prediction using potentials from deep learning

<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1923-7>

Received: 2 April 2019

Accepted: 10 December 2019

Published online: 15 January 2020

Andrew W. Senior<sup>1,4\*</sup>, Richard Evans<sup>1,4</sup>, John Jumper<sup>1,4</sup>, James Kirkpatrick<sup>1,4</sup>, Laurent Sifre<sup>1,4</sup>, Tim Green<sup>1</sup>, Chongli Qin<sup>1</sup>, Augustin Židek<sup>1</sup>, Alexander W. R. Nelson<sup>1</sup>, Alex Bridgland<sup>1</sup>, Hugo Penedones<sup>1</sup>, Stig Petersen<sup>1</sup>, Karen Simonyan<sup>1</sup>, Steve Crossan<sup>1</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup>, David T. Jones<sup>2,3</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1</sup>

### Article

## Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold


<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>

Received: 11 May 2021

Accepted: 12 July 2021

Published online: 15 July 2021

Open access

 Check for updates

John Jumper<sup>1,4,5\*</sup>, Richard Evans<sup>1,4</sup>, Alexander Pritzel<sup>1,4</sup>, Tim Green<sup>1,4</sup>, Michael Figurnov<sup>1,4</sup>, Olaf Ronneberger<sup>1,4</sup>, Kathryn Tunyasuvunakool<sup>1,4</sup>, Russ Bates<sup>1,4</sup>, Augustin Židek<sup>1,4</sup>, Anna Potapenko<sup>1,4</sup>, Alex Bridgland<sup>1,4</sup>, Clemens Meyer<sup>1,4</sup>, Simon A. A. Kohl<sup>1,4</sup>, Andrew J. Ballard<sup>1,4</sup>, Andrew Cowie<sup>1,4</sup>, Bernardino Romera-Paredes<sup>1,4</sup>, Stanislav Nikolov<sup>1,4</sup>, Rishub Jain<sup>1,4</sup>, Jonas Adler<sup>1</sup>, Trevor Back<sup>1</sup>, Stig Petersen<sup>1</sup>, David Reiman<sup>1</sup>, Ellen Clancy<sup>1</sup>, Michal Zielinski<sup>1</sup>, Martin Steinegger<sup>2,3</sup>, Michalina Pacholska<sup>1</sup>, Tamas Berghammer<sup>1</sup>, Sebastian Bodenstein<sup>1</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Oriol Vinyals<sup>1</sup>, Andrew W. Senior<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1,4,5\*</sup>

## AIインフラ構築にかかる莫大なリソースの問題

1. トレーニングセット構築のための莫大な計算リソース（富岳、クラウド）
2. 大勢のエンジニアリング人材（データ整備、システム構築、システム保守、サービス提供など）——アカデミアでこういった人材を大勢雇用することは困難！



## 23 アカデミアでの基礎研究振興の課題

最近の非常に大きな改善点：若手のチャレンジを実現する**JST創発**の設置  
→**講座制等でのPIの研究への貢献から脱し、自身のチャレンジに集中できる**  
(私自身は、**京都大学白眉プロジェクト**に同様の機会をいただいた)

---

一方で、シニアなPIが運営する大規模プロジェクトでは長期的に研究に参加してくれる優秀な人材が不足→**日本の研究力は長期的には落ちるのでは？**

シニアなPIは、学生（2年または5年）や短期雇用のポスドク（～3年）を指導しながら、**他の人材なしに**、これまでのような成果創出を続けられるのか？

(答え：可能！**ただし、膨大な雑務がなければ。。。**)

---

**若手独自のチャレンジを支援する（最優先）と同時に、シニアなPIの雑務を減らす仕組み（役割分担、長期雇用の支援スタッフなど）が必要では？**

## 24 まとめ (WPI-ICReDD)

- ▶ 計算科学・情報科学・実験科学を融合し、化学反応の設計と発見を革新することを目指す
- ▶ 6つのフラッグシッププロジェクト (FP) を設定
- ▶ 計算・情報技術を創出するFP-Iと、実験をベースとする応用研究のFP-II~VIとのフィードバックループを組みこことで、拠点一丸となって融合を推進
- ▶ 若手からのボトムアッププロジェクトを支援し、インパクトの創出を持続的・発展的に展開
- ▶ 現在、補助金による支援期間終了後の自走に向けた取り組み (MANABIYA、List サステナブルDX触媒連携研究プラットフォーム、産学連携講座、など) を強化中
- ▶ アカデミアにおけるAIインフラ構築に関する課題を議論
- ▶ アカデミアにおける基礎研究振興の課題 (長期的な大型プロジェクトでの人材不足)

