

特任教授・中村 振一郎

大学院先導機構 フロンティアデータサイエンス 化血研寄附講座

▶ 研究内容

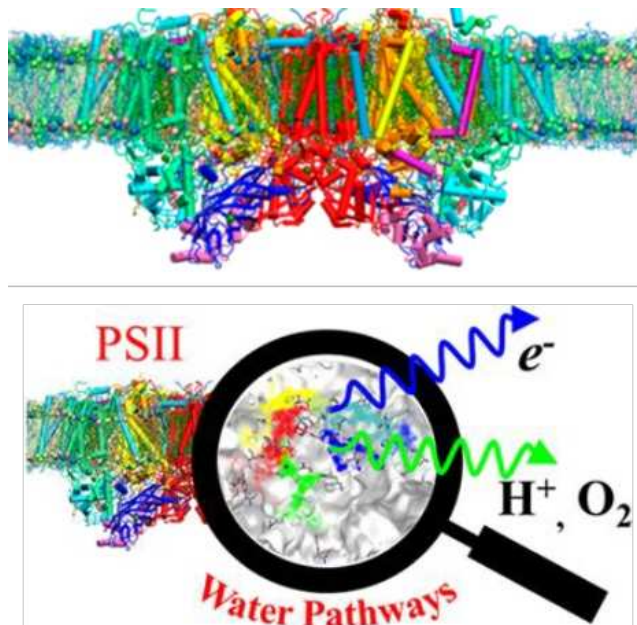
【背景・目的】

光合成は水から太陽光で酸素を生み出しCO₂からデンプンを合成しています。この究極の自然知能を師と仰ぎ人工知能・データサイエンスを駆使して産業界の課題解決に向かいます。さらに圏論 あたらしい数学 によ方法論の開発を進めています。

【研究概要】

天然光合成は地球の生命維持装置です。食料とエネルギー問題に究極の解を提示しています。右図にその高効率かつ高選択性のタンパク質からなる触媒 PSII を示しました。

量子力学と分子科学シミュレーションを駆使してそのメカニズムの解明し 右図の下 電極をデザインすることが目標です。この技術は下に例示するいくつかの課題に応用が可能です。



- 時間とともに変化しつつある種々の波形データからその機能を推定する技術
- 分子や材料の発する光、音、匂いを定量的にセンシングしてその機能・稼働の特徴と対応させる技術
- 原理原則に立ちもどって解決策を得るのは難しいが破壊や劣化を前にしてすぐ対応しなければならないとき、データに語らせて対応する技術
- 人の健康や機器の稼働状態をモニターして危険予知をおこなう技術

▶ アピールポイント

データサイエンスという言葉が無かったころから実施していた産業界で鍛えた計算科学です。

▶ 参考資料

• J. Am. Chem. Soc., 135, 15670, 2013.

▶ 特許

特開2017-117469

▶ 関連リンク

熊本大学『フィロソフィアの扉』第46回「大学院先導機構
中村 振一郎特任教授」再掲

▶ キーワード

圏論 Schubert Calculus Bayes統計 計算科学 量子力学 量子化学 分子動力学 第一原理計算 category theory Bayes Statistics computational science quantum mechanics quantum chemistry Molecular Dynamics Molecular Dynamics first-principles calculations 総合理工 計算科学 計算科学

《ご連絡先》 コーディネータ 有田 健一 TEL 096-342-3247 FAX:096-342-3247 mail:ke-arita@jimu.kumamoto-u.ac.jp