

(2)-1 「京」の利用について(産業利用枠)

- 「京」の産業利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」の成果を社会に還元する上でも重要。
- 平成24年度に行った「京」の一般公募では、産業利用課題の応募は29件で要求資源量が4倍以上の競争率になるなど、産業界からも想定を上回る利用の申し込み。
- 平成25年度においても産業利用枠を含む追加公募を実施(平成25年度下期分)するなど、産業利用促進に向けた取り組みを加速。
- 「京」を試用して有用性を見極めと本格利用に向けた準備のためのトライアル・ユース課題は随時募集。
- 「京」の産業利用に当たって、コンシェルジェ的相談窓口を設置し、技術相談、利用支援を実施することにより、産業利用の促進を図る。また、産業利用拠点であるアクセスポイントを東西2カ所に設置。

産業利用枠(配分資源量は「京」全体の5%程度)利用の企業

<成果公開型 (17件)>

清水建設、竹中工務店、ブリヂストン、住友ゴム工業、武田薬品工業、大日本住友製薬、富士フイルム、東洋紡、住友化学、日東電工、川崎重工業、コベルコ科研、みずほ情報総研、トヨタ自動車、トヨタテクニカルディベロップメント、日本自動車工業会

<成果非公開型 (5件)>

大日本住友製薬、第一三共、富士通アドバンステクノロジー、アスミス、数値フローデザイン

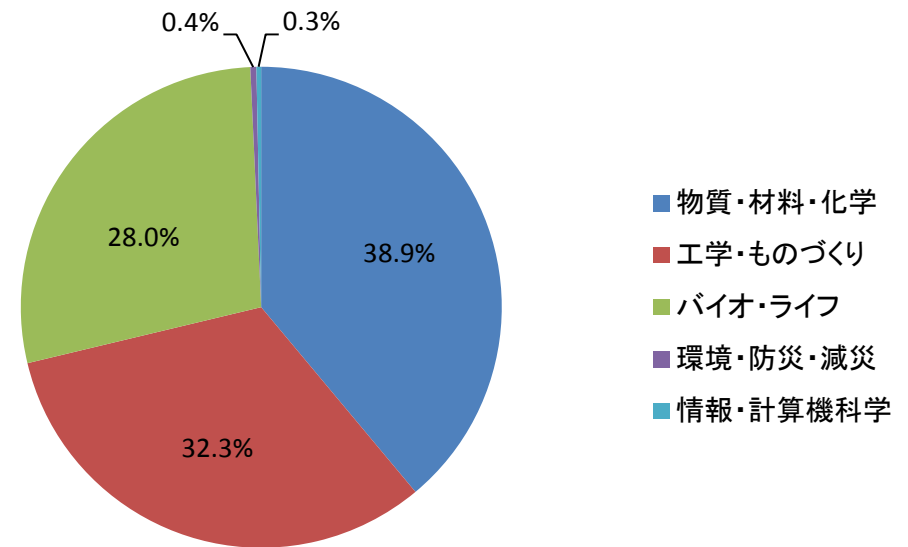
<トライアル・ユース※ (9件)>

三ツ星ベルト、東洋ゴム工業、茨城日立情報サービス、半導体理工学研究センター、本田技術研究所、昭和電工、地震工学研究開発センター、フォーラムエイト、川崎重工業

これまでに「京」を利用した企業は、**総勢49企業**。

(平成25年5月20日現在)

産業利用枠課題の利用分野



産業利用枠課題における利用分野別の配分資源量の割合

(平成25年5月20日現在)

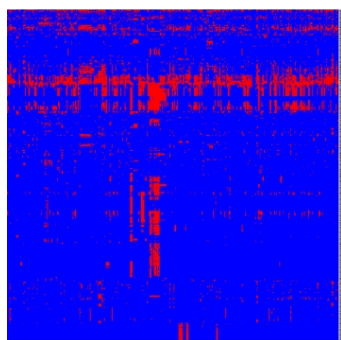
(2)-2 産業利用枠での成果事例

● 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築 (研究代表者: 京都大学・奥野恭史)

製薬企業11社が参画し、タンパク質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成。医薬品開発の成功確率向上と迅速化により、我が国製薬産業の競争力向上に貢献。

医薬品の開発には10年以上の長い年月と500億円以上の巨額の費用が掛かると言われており、シミュレーションによる開発期間・コスト縮減が期待されている。

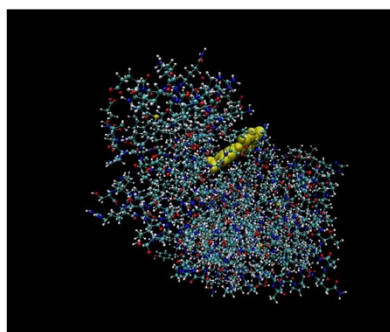
そこで、製薬企業11社と共同で「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを推進。論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア(12万ペア)をもとに、大量のタンパク質と化合物の結合データを学習し、結合パターンの統計ルール化を行い、「京」による超高速計算で、世界最大規模(189.3億ペア)の結合予測に成功。今後は、予測結果をもとに、各製薬企業が独自に医薬品開発につなげる。



化合物(500種)
(→最終的には3000万種)

タンパク質(388種)
(→最終的には631種)

「京」による結合予測結果
(赤色が相互作用あり)



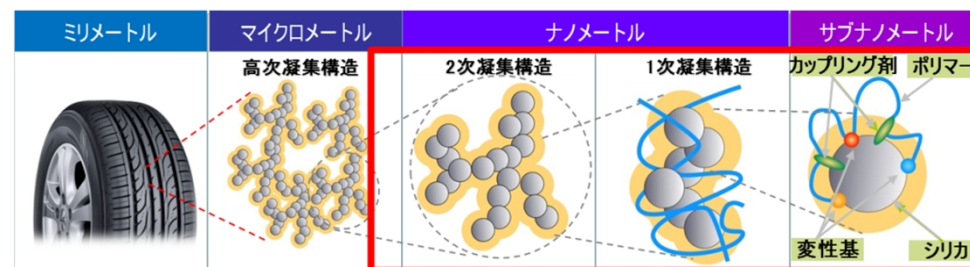
タンパク質と化合物の
結合シミュレーション

● 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発 (研究代表者: 住友ゴム工業(株)・岸本浩通)

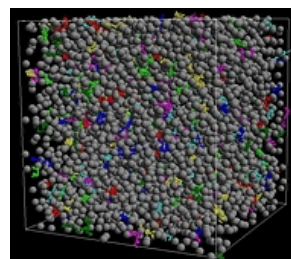
「京」による大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションにより、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。

低燃費・安全性(グリップ性能)・省資源(ゴム強度)といった相反するタイヤ性能を両立させ、タイヤゴムを高機能化させるためには、分子・ナノレベルでの構造解析が必要となるが、企業レベルでのスパコン性能の制限から従来は困難であった。

「京」を用いることで、大規模でありながら、分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となり、ゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーション。タイヤを高機能化させるための研究に活用し、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。



この領域すべてを分子レベルで丸ごとシミュレーション



タイヤ材料のナノレベルでのシミュレーション

(2)-3 「京」の利用について(産業界)

産業界における利用分野

一般利用枠及び戦略プログラム
を含む企業所属の課題参加者

240名

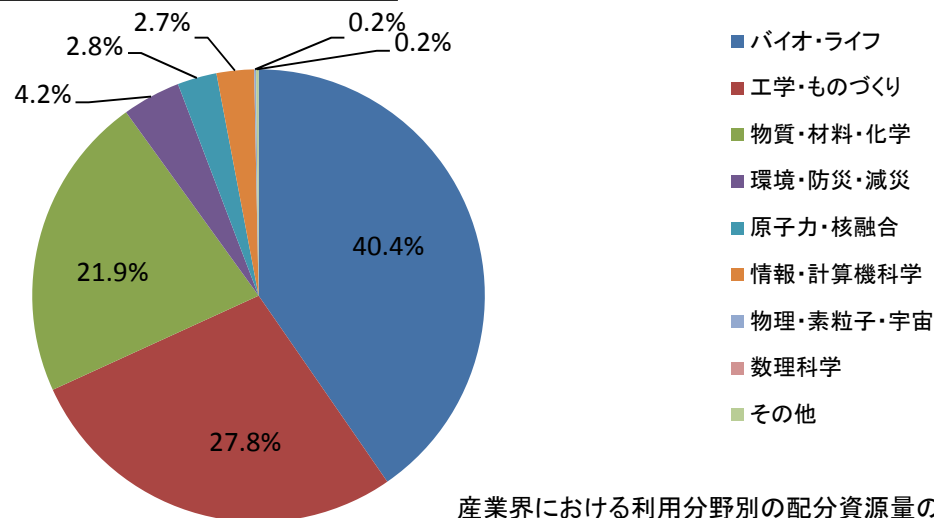
(平成25年3月末時点)

(内訳)

産業利用課題: 164名

一般利用課題: 32名

戦略プログラム課題: 44名

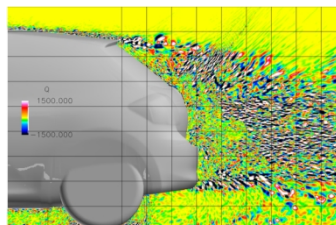


産業界が参画している課題の成果事例(戦略プログラム)

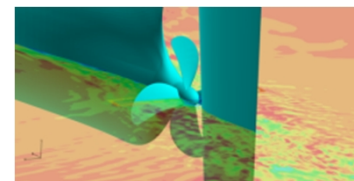
● 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発 (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)

複雑な車両形状と実車走行状態を忠実に再現した空力シミュレーションに世界で初めて成功。風洞実験をシミュレーションで代替えし、開発コスト・開発期間の大幅な削減が期待される。

自動車、船舶等を対象として、直接シミュレーションの設計適用可能性を参画企業(主要自動車メーカー、電機メーカー等計26社)から風洞実験データなどの検証データを提供してもらい、精度検証を実施。自動車に関しては、複雑な車両形状を忠実に再現し、実車の走行状態を忠実に考慮した、世界初の自動車空力シミュレーションを実施し、船舶に関しては、スクリューの回転やそれによる気泡の発生影響も含め、船体周りの流れを完全に再現し、曳航水槽試験を数値計算に置換する目途が出来た。



車両挙動の全乱流渦のシミュレーション



(財団法人 日本造船技術センター 提供)

プロペラ回転や波の影響も考慮した
超大規模実用計算