

文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」
HPCI 戦略プログラム 分野2 「新物質・エネルギー創成」
計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
計算分子科学研究拠点(TCCI)第5回運営委員会議事概要

日時：2012年5月12日(土) 14:30~17:00

場所：分子研200会議室

参加：高塚、岡崎、関野、斉藤、榊、兵頭、佐藤、信定、吉井、石村、石谷

議事

I. 前回議事録の確認 (資料1)

○原案通り承認した。

II. 報告事項

1) 京の利用の重点枠について (資料2)

○重点枠については、重点課題7件の申請書を用意して頂いたが、分野マネージャと拠点長との会議で、4件を申請することになった。その内、分子科学は1件で、岡崎先生から申請のあったものが選ばれた。

2) HPCI システム利用研究課題募集説明会について (資料3)

○京利用の一般枠について募集説明会が始まっており、公募受付期間は、5/9 から 6/15 まで。特別支援課題の先生は、京でプロダクションランを行うためには、一般枠に応募して頂く必要がある。今回の公募で通れば、H26年3月までの1年半使える。次回の公募は、H26年度分からの予定。次の公募に関してCMSIから改善の要求を挙げている。

○今回の審査では、広く通すという話もある。

○CMSI の方向としては、課題の見直しが予定されており、特別支援課題→重点課題も今後有り得る。

III. 運営委員会の要項(案)について (資料4)

○京大の佐藤先生に運営委員をお願いするために委嘱状が必要であり、そのために要項が必要となった。また、分子研の中での位置付けも考えて成文化することとしたい。

○原案について暫定的に承認した。任期の点も含めて、次回の運営委員会で、再度審議する。

IV. 平成24年度活動計画 (資料5)

1) シンポジウム、研究会

TCCI 研究会

(課題検討研究会)

産学連携シンポジウム

実験化学との交流シンポジウム

【ご参考】CMSI 研究会 12/3(月)~12/5(水) @分子研 OCC

2) 教育・人材育成

ウインターカレッジ-分子シミュレーション-

ウインターカレッジ-量子化学-

超並列技術ワークショップ

分子シミュレーション夏の学校

分子科学夏の学校

○CMSI では Topical Meeting を年に2回ほど行う予定もあるので、TCCI でのイベントは増

やさない。資料5に大雑把なスケジュール案を記載した。

- 全体研究会の案として、①特別支援研究員に、ボスの話ではなく、何をやっているか、生々しい話をしてもらう、②課題検討研究会：現在、TCCIに参加していない若い人を招待して行うことを考えている。担当は、山下先生、サポートとして、石村さん、吉井先生、人材育成の観点から信定先生。時期は10月頃で検討。
- 超並列技術ワークショップは、9月の分子科学討論会[9/18(火)～9/21(金)、東大本郷キャンパス]の直前または直後で行う。担当は、石村さん、サポートは関野先生。
- 実験化学との交流シンポジウムは、高塚先生、榊先生、岡崎先生で企画する。新・元素戦略との共同または連続開催の可能性もある。時期は11月。
- 産学連携シンポジウムは、兵頭先生他の社会連携委員にお願いする。佐藤先生に、社会連携委員になって頂く。内容としては、企業に入った人(学生の先輩)の話を企画として考えているが、人選が難しい。
- TCCI ウインターカレッジの分子シミュレーションは吉井先生、奥村先生、量子化学は江原先生にお願いする。分子シミュレーションの日程は、12/11(火)から12/14(金)の予定。また、分子シミュレーションでは、分野1とも連携(講師派遣など)する予定。
- CMSI 人材教育からは昨年度と同額の予算を頂いているが、分子科学夏の学校も支援するため若干調整するとの提案があり、了承した。

3) TCCI 予算案

(資料6)

- 資料6により昨年度実績と比べた今年の予算例の説明があった。昨年度と比べて、人件費が多く活動費が少なくなっている。昨年度と同じ研究会1回とシンポジウム2回で、旅費などの大半は消える見込み。

4) ナノ統合ソフトの展開について

分子研センター

計算科学振興財団 (FOCUS)

(資料7)

- ナノ統合ソフトの FOCUS への展開について、FOCUS との打合せ結果の報告があった。
- FOCUS との間で、包括的な守秘契約の話を進めることを承認した。また、初回のインストール費用については、CMSI に予算を要求していくことになった。

V. その他

- 人材育成について、今年度、名大と総研大で単位互換の実績が挙げるとの報告があった。
- 授業配信の受入れについて東大などから依頼はあるが、内容的な問題と、総研大の場合には特論の仕組みがないため難しいとの報告があった。
- 「将来の HPC システムのあり方」の公募への対応状況の報告があった。

VI. 今後の予定

5/22 (火) 17:00～19:00 CMSI 企画室会議 @東大 理学部1号館 338号室

5/30 (水) HPCI 戦略プログラム 分野2×分野5 異分野交流研究会

6/14 (木) -15 (金) 「京コンピュータ・シンポジウム 2012」

@神戸大統合研究拠点コンベンションホール

7/10 (火) 第4回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会 @理研 AICS 6F

以上