

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8回運営委員会議事概要

日時：2013年6月1日(土) 13:30~15:30

場所：分子研実験棟3階303セミナー室

参加：高塚、榊、岡崎、兵頭、田中、齊藤、江原、佐藤、長岡、事務局(石谷)

議事

I. 前回議事録、議事概要の確認

資料1、資料2

○原案通り承認した。前回の議事に対応して、産学連携の経費に関するアンケートを行う。

II. 報告事項

1) 人事について

資料3

○(重点研究員を除く)研究員の任期は原則2年間とし、再任は妨げないが、見直すこととしている。今年は何人かがその対象となる。今後の研究員の採用・配置については、H24年臨時人事検討委員会に諮問し、資料3のように答申を得ている。採用枠については、部会は移動しないこととしているので、採用枠のある部会はまず部会で相談して欲しいと報告があった。

2) 今後のHPCI計画推進のあり方検討WG中間報告(案)について

資料4

http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/25/05/1334946.htm

○報告書が長いので、コメントする部分分かり難いとの意見があるため、何ページを読んでも欲しいかをお知らせする(特にP16, P17)。また、来年度の公募に向けて、連続研究会的な活動を始める必要がある。9月の研究会前後から始めることを検討することとした。

3) 京コンピュータシンポジウム(5/13)について

資料5

○国民に向けた京の成果を報告するシンポジウムで、国会議員も数名参加し、懇親会では、ポスト京に向けた決起大会であったとの報告があった。また、分野2を代表して常行先生が報告したが、その内容はエネルギーに絞ったものであった。

4) H25年度第1回CMSIエネルギーWG(5/2)

資料6

5) 第12回理研連携推進会議(4/17)について

資料7

HPC Summer School(6/23~28)他

○HPC Summer Schoolには、TCCIから2名参加することになったとの報告があった。石村さん(CMSI予算)、安藤さん(TCCI予算)。

6) 日本化学会年会特別企画(3/25)について

資料8

○当日の講演内容を纏めた資料については、講演者に内容を確認して頂いた後で、ホームページ、パンフとして配布することとした。文科省にも送る。

7) 平成24年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題

中間報告会(3/14, 15)について

資料9

8) 1st International Workshop on Strategic Development of

High Performance Computers(3/18, 19)について

資料10

9) ナノ統合ソフトのFOCUSへのインストール

資料11

○H24年度のCMSI予算で、modylasとermodがFOCUSにインストールされたとの報告があった。FOCUSからは、FMOを含めて、年1回程度の講習会開催の要請がある。

○FOCUSへインストールしたソフトについては、TCCIでも宣伝していくこととした。

III. 審議事項

1) H25年度予算について

資料12

○H25年度予算については、前年度以上に人件費が増えること、人件費増に対応して、分子研雇用の研究員の研究費を昨年度の額から減額すること、また、人材育成・教育の予算が、

TCCI の移管されたことなどの報告あり、承認した。

2) H24 年度補正予算について

資料 13

○H24 年度補正予算 (H25 年度繰り越し) について、業務委託にのみ使える予算であること、内容として、1) バージョンアップ版のインストール、動作確認など、2) 利便性の向上、3) ホームページの拡充、4) 民間企業のソフト試用の環境のため、現在 TCCI で保有しているサーバーをセンター管理下への移行作業との説明があり、承認した。

○H24 年度から「元素戦略対応部門」と「ソフトライブラリ部門」を創設している。本来なら「ソフトライブラリ部門」には研究員を配置すべきであるが、今年度は、この補正予算により業務委託が可能となった。分子研計算科学研究センターで活用して欲しい。

○分子研計算科学研究センターでは、アカデミックユーザを中心に、ナノ統合ソフトをセンターにインストールし、ユーザが使えるようにしていく。ホームページの拡充も含め、技術職員が対応する。できるところから始めて、レベルアップをしていく。

3) 委員の委嘱期間 (H26 年度、H27 年度) について

○今年度の運営委員委嘱の際、複数年度も可能との意見があり、H26 年度、H27 年度については一括で委嘱してはどうかとの提案があった。欠席の委員も含めて個別に確認し、来年度の委員の委嘱を行うこととした。

IV. 平成 25 年度活動計画

資料 14

1) シンポジウム、研究会

○第 4 回の研究会の企画は、長岡委員、江原委員、高塚委員長で行うこととした。内容としては、京を使った成果報告 (半日)、残りの時間で、エクサに向けて分子科学で何ができるか、特別支援課題の先生を見えるようにする会にしたいとの報告があった。

○実験化学との交流シンポジウムについては、榊委員を中心に事務局で企画することとした。

○産業連携シンポジウムについては、兵頭委員を中心に社会連携委員会で企画することとした。

○超並列化技術国際 WS については、関野先生、石村さんが企画することとした。

2) 教育・人材育成

○阪大が中心となってネットワーク授業「CMSI 計算科学技術特論 A」が進行中。これに関して、以下で、事後、録画が公開されているとの報告があった。

http://www.cms-initiative.jp/ja/events/CMSI_events/2013_haishin

○分子研における平成 25 年度総研大集中講義の計画も報告があった。

<http://www.ims.ac.jp/learn/kougi.html>

3) 広報

4) 社会連携

5) スパコン連携

6) 資源提供

7) 各部会

V. その他

VI. 今後の予定

06/12(水) 今後の HPCI 計画推進のあり方検討 WG 中間報告のパブコメ終了

10/16(水)~18(土) CMSI 国際シンポジウム・サテライトミーティング

@東大本郷、名大、CMSI 神戸

10/21(月)、22(火) CMSI 国際シンポジウム @東大本郷、伊藤国際学術研究センター

12/11(水)~13(金) CMSI 全体研究会 @物性研

以上