

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 9 回運営委員会議事概要案

日時：2014 年 1 月 31 日 (金) 11:00～12:30

場所：名古屋大学 野依記念学術交流館 1 階 1A 会議室

出席：高塚、岡崎、榊、山下、長岡、田中、江原、関野、佐藤、奥村、事務局 (石谷)

議題案

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。

II. 報告事項

○エクサのプロジェクトの進め方について、常行先生から 3 方式の可能性があることが分かった。①戦略分野方式 (現状 5 分野+新分野経済)、②CREST (公募) 方式、③理研直轄。

1) H25 年度 CMS I 運営委員会 (12/12) について

資料 3

○HPCI コンソーシアムのエクサ提案に向けた話、CMSI の中間評価の話があった。

2) H25 年度 CMS I 企画室会議 (1/24) について

資料 4

○予算削減への対応、京資源の調整があった。但し、京資源については、別途、常行先生が調整することになった。

3) 第 14 回理研連携推進会議 (11/08) について

資料 5

○文科省より広報に力を入れるように依頼あり対応中。理研のエクサへの提案資料が入っている。全てが固まる前に対応を検討する必要がある。

4) 今後の H P C I 計画推進のあり方に関する WG (11/13)

資料 6

○人材育成、エクサでのフラッグシステムについて報告あり。最終報告に向けたまとめに入っている。

5) 基盤ソフト維持管理について

資料 7

○Calnos, ERmod, FMO in GAMESS, MODYLAS, REM, SMASH (予定) を分子研センターなどにインストールして公開予定。民間用には TCCI マシンを転用するとの報告があった。

6) 触媒・電池の元素戦略について

○江原委員より、2/28, 3/1 に開催される大型施設シンポジウムへの分子科学分野の参加者の旅費を、元素戦略触媒・電池拠点から分野振興としてサポートする。また、石村さんが開発中のプログラム (仮称 SMASH) を元素戦略触媒・電池の研究に利用するとの報告があった。

III. 審議事項

1) H26 年度予算案について

資料 8

○H26 年度予算は 10%カットとなり、消費税も 8%に上がる。これらに対応するために、新規採用の研究者については年俸の上限を設定することにつき審議し、承認した。

IV. 研究員の任期と雇用継続・交代について

1) 人事公募状況

資料 9

○資料に基づき、人事公募状況の報告があった。尚、1 番については応募予定者 (1 名) から電話連絡あり。また、5 番については、フランスからの応募書類が昨日届いたとのこと。

2) 分子研雇用者の H26 年度雇用継続の確認 (1 月末)

○分子研雇用者で継続雇用が確定している人については、1/31 付けで継続申請を行うとの報告があった。

V. H26 年度, H27 年度運営委員の委嘱について

○H26 年度、H27 年度、2 年間の運営委員の委嘱手続きを始めることのお知らせがあった。

VI. 平成 25 年度活動計画・実施状況

1) シンポジウム、研究会

○実験化学との交流シンポは、榊先生が企画して頂いて、内容は良かったが、研究員の参加が少ないのが残念。来年からは旅費の取り置きなどを考慮するとの報告があった。

2) 教育・人材育成

○2/4 超並列超並列化技術国際ワークショップを実施予定。当初予算は海外からの招聘 1 名であったが、東京拠点の予算で更に 2 名を招聘する。招聘者には、豊橋技科大でもセミナーで講演して頂く予定との報告があった。

○CMSI-TUT 見える化シンポは昨年好評だったので、今年も開催予定 (3/8)。一般もターゲットとするため土曜日に開催との報告があった。

○TCCI ウインターカレッジ(量子化学)は 12/17・18 に実施。例年通り 50 名程度が参加。受講者のレベルに大きな差があるので、どこのレベルに合わせるか難しいとのこと。

○TCCI ウインターカレッジ(分子シミュレーション)は 10/23-25 に実施。100 名程度が参加。今年は分子研の予算が減ったので学生は旅費のみ支給との報告があった。

3) 広報

○次のトレントは、3 月発行予定との報告があった。

4) 社会連携

5) スパコン連携

6) 資源提供

○分子研センターの利用率が上がっているとの報告があった。

7) 各部会

VII. その他

○参考資料 1, 2 について説明 (エクサ予算削減関係) があった。

VIII. 今後の予定

01/31(金)13:20 TCCI 第 3 回産学連携シンポジウム @名大 野依記念学術交流館

02/04(火)10:00 超並列化技術国際ワークショップ @東大山上会館

02/28(金)-3/1(土) 元素戦略プロジェクト・大型研究施設連携シンポ 2014 @東大物性研

参考資料

参考資料 1 CSTP でのエクサスケールコンピュータの評価資料

参考資料 2 H26 年度文科省予算 HPC 関係

参考資料 3 3/8「異分野融合による新材料開発のための計算科学

- 光合成マンガクラスターの理論計算」シンポジウム @理研 AICS

以上