

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10回運営委員会議事概要案

日時：2014年5月21日（水）18：30～20：00

場所：名古屋大学 ES 総合館 1階 会議室

参加：高塚、岡崎、榎、齊藤、関野、佐藤、長岡、松本（田中代理）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

1) 委員会メンバーについて： 資料3

○運営委員として、兵頭先生に代わって、松本先生に加わって頂く提案があり、承認した。

○社会連携委員会の責任者には、太田先生にお願いする提案があり、承認した。

2) 人事について：研究員の採用状況 資料4

○最初の公募で決まらなかったところも2回目で採用できたが、2回目で決まらない場合は採用枠の再検討も必要との指摘があった。

3) 5/15 理研連携推進会議 資料5

○重要な点の報告があった。

資料5のP33「今後のHPCI計画推進のあり方についての要旨」（中段の後半に）「フラッグシステム等の開発と並行して、新たな課題や社会的ニーズに対応し、当該システムの能力を最大限に発揮するアプリを協調的に開発」とある。現在の戦略機関終了後から次の戦略機関発足までの間は、アプリ開発に注力する可能性がある。

○5/30(金)15:00からの第2回小宮山委員会に、高塚先生が傍聴者として参加する。

4) ポスト京に向けた動きについて 資料6

5) TCCI 事業報告

・1/31 TCCI 第3回産学連携シンポジウム

○よい内容であった。企画にご尽力を頂いた兵頭先生が亡くなられたのは残念である。

・2/04 超並列化技術国際ワークショップ @東大山上会館

○今回は、予算追加のお蔭で3名を海外から招聘でき、国際WSらしくなった。

・基盤ソフトウェア（H24年度補正予算）

○MODYLAS、FM0、Calnos、Ermod、REMの利便性を向上した。TCCIマシンの管理を計算センターに移管し、外部から民間企業が使えるようにした。現在、1社から利用希望が来ている。

・TCCI ホームページ改修

○基盤ソフト、英語のページを追加した。また、課題紹介のところに研究室をリンクした。

6) CMSI イベント報告

・2/28-3/1 元素戦略プロジェクト・大型研究施設連携シンポ2014

・3/08 CMSI 見える化シンポジウム

○元々、NHKに無視されたことから始まったが定着してきた。今回も好評であった。

・3/20 第3部会研究会「分子集合系における先端分析と大規模計算
 ～高度水利用に資するスマート分離技術の基盤構築を目指して～」

7) H26年度予算状況 資料7

8) 触媒・電池の元素戦略について

○CMSIからは費用拠出の要請があり、CMSI関連イベントへの参加などの場合、旅費支給で対応することしたとの報告があった。

III. 審議（ディスカッション）事項

1) H26年度活動計画について 資料8

・ TCCI 第5回研究会、他

○TCCI 第5回研究会は、10/17(金)、18(土)に開催する。企画担当は、齊藤先生、佐藤先生にお願いしたいとの提案があり、承認した。予算削減のため、「実験化学との交流シンポ」は開催せず、研究会に実験科学者も招聘する。

○第4回産学連携シンポとして、産応協のスパコンセミナーを共催する。産応協側の委員の茂本さんより、元素戦略をテーマにしたいとの要望がでているため、企画担当は、太田先生、江原先生、榊先生にお願いしたいとの提案があり、承認した。

・ CMSI 関係 (参考)

資料9

IV. その他

V. 今後の予定

・ 6/1-6 HPC サマースクール @Budapest, Hungary

・ 8/23 京コンピュータシンポジウム 2014 (8/23-24 展示あり) @科学技術館、竹橋

○CMSI から松本先生が講演。展示は、メタンハイドレートとウイルスのCGを予定。

・ 9/22 (月) ? 夕方 TCCI エクサスケール検討状況報告懇談会 (仮称) @ 広大

○分子科学討論会の行事が決まり次第、日時を調整する予定。

・ 10/17、18 ☆第5回全体研究会 @分子研 OCC

・ 10/31 京を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (第1回)

@コクヨホール、品川

○CMSI からは、押山先生が講演予定。

・ 11/10 Nose Dynamics 30 years Symposium @慶應義塾大

・ 12/8-10 CMSI 全体研究会@東北大学片平キャンパス 片平さくらホール

・ 1/23 第31回産応協スパコンセミナー@東大弥生講堂一条ホール

○次回の TCCI 運営委員会は、以下のように開催する。

日時 : 2014 年 10 月 17 日 (金) 11:00 から

場所 : 岡崎コンファレンスセンター 2階小会議室

以 上