

# (5) 体制構築-1

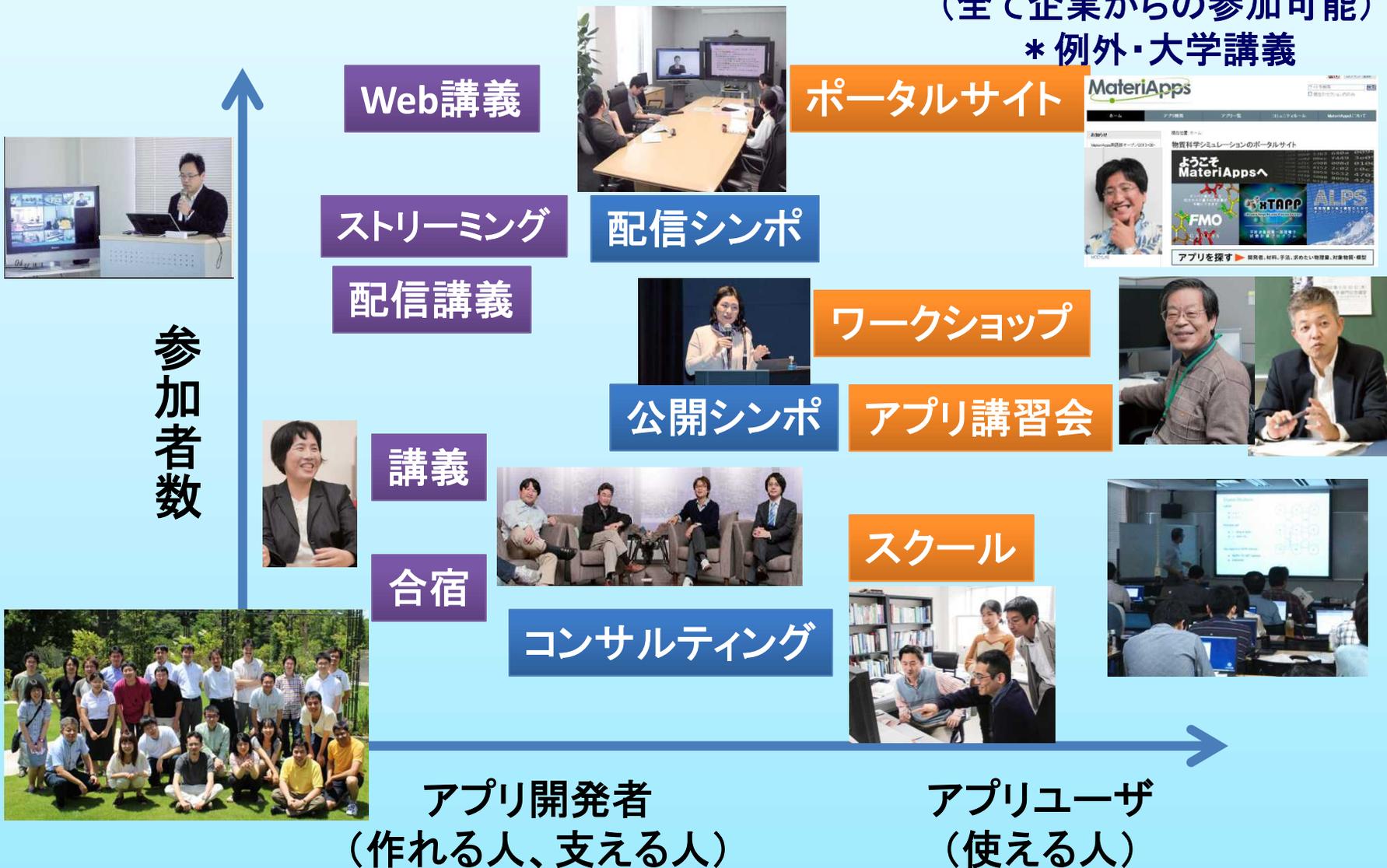
## <実施計画と最終目標>

前半 (H23～H25上)	後半 (H25下～27)	最終目標
<p>(当初計画) 活動の中核となる物性、分子、材料の<b>戦略機関を各拠点内に設置</b>し、「京」やHPCIを利用する研究者の支援体制を整え実施する。神戸AICS内に<b>CMSI神戸拠点</b>を設置し、CMSI内外の分野との連携、支援を実施する。<b>9大学連携の配信講義</b>を実施し、全国的な教育活動を展開する。</p>	<p>(当初計画) 引き続き、CMSI全体、および、各分野拠点において、支援活動、イベント開催活動を継続する。 <b>「京」の一般課題申請サポート</b>を実施する。 Pj終了後も戦略機関が分野振興活動を継続的に取り組める体制を構築する。</p>	<p>戦略機関である物性研、分子研、金研が、教育拠点9大学、産官学連携拠点2機関と協力し、HPCIを用いて社会的に重要かつ喫緊である課題を、計算物質科学を通して解決していくための継続的な取り組み体制を構築する。 また、世界でも類を見ない3分野が融合した、最大規模のネットワーク型拠点として、国際社会における計算物質科学研究の中核となることを目指す。</p>
<p>(実施内容) 各分野の戦略機関を物性研、分子研、金研とAICS内に設置して分野振興拠点、融合拠点とした。CMSI全体、および、各拠点において、セミナーや研究会、シンポジウム、また、産官学連携研究会、実験家との連携会議、アプリケーション講習会等を実施した。 CMSIとして実施した<b>元素戦略WGはH24年度より元素戦略拠点からの委託研究に発展</b>。各拠点に多くのCMSI関連研究者が参加した。 H24年度教育9拠点に配信講義設備を導入し、<b>H25年度より配信講義開始</b>。</p>	<p>(見直した計画) イベントが多すぎるとの指摘を作業部会から受けている。 実際には、物性、分子、材料の各分野拠点が独自に開催したり、他の戦略分野との間の連携イベントとして、開催している行事が多く、企画や開催の負荷は分散している。 ただし、各イベントの開催趣旨や目的を再確認し、効率的、かつ、効果的にイベントを開催する。</p>	

# (5) 体制構築-2 CMSIの人材育成・教育活動

(全て企業からの参加可能)  
\* 例外・大学講義

参加者数



## (5) 体制構築-3

### 教育配信事業:「計算物質科学特論A」実施

目的: 計算物質科学の振興と社会貢献に向けた人材の育成  
対象: 大学院生、PD、若手研究者、社会人等

【日時】 平成25年4~7月木曜13:00-14:30

【場所】 配信元: 大阪大学豊中基礎工G217

第1回	プログラム高速化の基礎
第2回	MPIの基礎
第3回	OpenMPの基礎
第4回	Hybrid並列化技法(MPIとOpenMPの応用)
第5回	プログラム高速化の応用
第6回	線形代数演算ライブラリBLASとLAPACKの基礎と実践1
第7回	線形代数演算ライブラリBLASとLAPACKの基礎と実践2
第8回	高速化チューニングとその関連技術1
第9回	高速化チューニングとその関連技術2
第10回	行列計算における高速アルゴリズム1
第11回	行列計算における高速アルゴリズム2
第12回	古典分子動力学法の高速化1
第13回	古典分子動力学法の高速化2
第14回	量子化学計算の大規模化1
第15回	量子化学計算の大規模化2

### 受講場所

- ◆教育機関9大学11か所に受講設備を整備
- ◆H24補正予算で多地点会議システム購入
- ◆H25中に産総研に追加設置予定
- ◆分野5との連携で筑波大に配信予定

◆ビデオとテキストはWebにUP  
⇒400回以上のアクセス講義有!

CMSI教育拠点

金沢大学  
名古屋大学  
神戸大学(CMSI研究拠点)

東北大学  
総合研究大学院大学(分子科学研究所)  
東京大学物性研究所  
東京大学(本郷キャンパス)  
豊橋技術科学大学  
京都大学  
大阪大学

●H25下期: 教育シンポジウム3回開催  
●H26計算物質科学特論B 開講

- ◆165名(企業11名)参加!
- ◆多地点配信好評。次回参加希望者多

## (5) 体制構築-4

### CMDワークショップ(阪大-CMSI)

- ・日本で年2回アジアで年4回開催
- ・スパコンコース新設⇒参加企業との共同研究や講義利用アプリの普及につながる。
- ・アジアにアプリ普及を計画中



校長 赤井久純



フィリピンデラサル大

### アプリ利用者教育

- ・OCTA講習会。PJ開発ソフトの活用支援。
- ・H23,24にHPC産業利用スクール開催 (OpenMX、Phase、QMAS、RSDFT、FMO)
- ・H25よりアプリハンズオンにシフト(ALPS、FMO、xTAPP、feram、TOMBO、KKR、バージョン管理ソフト等)
- ⇒述べ130人(内企業11人)参加
- ⇒コミュニティ形成のきっかけを創造

### スクール活動

- ・夏の学校・ウインターカレッジを実施し、院生、若手研究者を育成(MD,量子化学)
- ・国際高並列WS実施し、最先端プログラミング技術の意見交換を実施し情報入手



- ・量子夏の学校で、若手とベテランが議論し世代間交流促進

### 大学院教育

- 若手教員が魅力ある講義を実施!
- ・名大で「分子物理学特論」をH24開講。
- ・総研大で「構造分子基礎理論」をH24開講
- ・東大で「物性科学のための計算数理Ⅰ・Ⅱ」「コンピュータ科学特論Ⅲ」をH23開講
- ・東北大で「マルチスケール材料科学」H25開講
- ・阪大で「計算物質科学特論A」H25開講



CMSI教員と院生の座談会でニーズを吸い上げる

# (5) 体制構築-5

## 物質科学アプリのポータルサイトの整備～MateriApps～

### 目的

- ◆アプリの普及発展
- ◆人材育成・教育
- ◆開発者と利用者の橋渡し

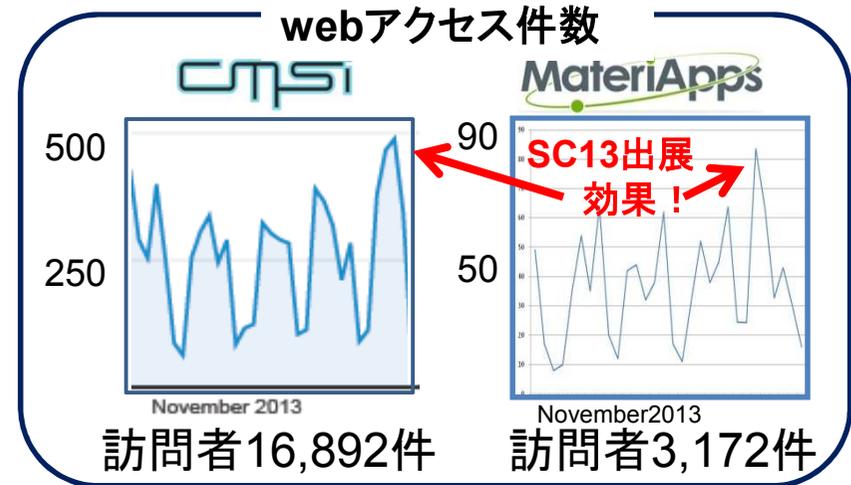


担当 五十嵐亮  
東大研究員



### <特徴>

1. 「やりたいこと・興味」から**検索可能**  
手法、物理量、対象モデル・物質 etc.
2. 開発者の声を利用者に紹介  
**アプリの魅力、アプリの将来性**を見える化
3. 共同研究・開発を支えるシステム  
**Web上でのソースコード開発**
4. **トライアル計算用USB**を用意  
**All-in-One**で全て立ち上がる



アクセスランキング

1. xTAPP	234件
2. ALPS	204件
3. OpenMX	203件
4. Ermod	183件
5. MODYLAS	165件

# (5) 体制構築-6 CMSIのイベント

(全て企業からの参加可能)



国際シンポ



参加者数

各種研究会

元素戦略シンポ



産官学連携シンポ

国際WS

大型研究施設シンポ

実験科学者  
連携会議

セミナー



技術交流会  
合宿

分野1-2連携シンポ/勉強会

産官学連続研究会

分野2-5連携シンポ



計算物質科学  
研究者  
(理論・実験)

Pj拠点  
大型研究施設  
異分野連携

産業界連携

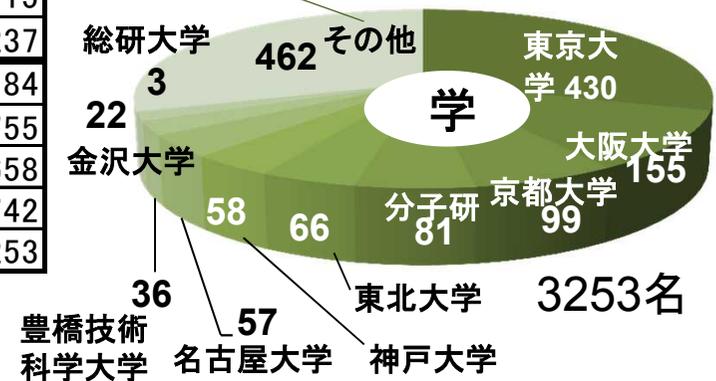
# (5) 体制構築-7

- ◆115件の主催イベントで **6237名動員**
- ◆CMSIコミュニティー会員数**800名超**
- ◆CMSI-web Pageview累計 **143,455件**

- ・人的NW構築
- ・振興促進
- ・若手活躍機会創出

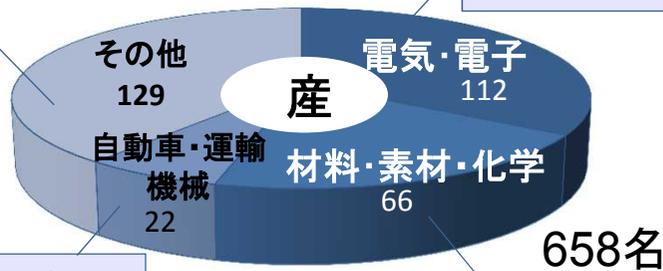
イベント	準備研究	本格実施			合計
	H22年度	H23年度	H24年度	H25年度 (~9月)	
全関連イベント数(含、共催・)	13	46	53	25	137
主催イベント数	12	33	45	25	115
のべ参加者数	827	2135	2370	905	6237
産独学区分有イベント数		28	36	20	84
のべ参加者数		1739	2146	870	4755
内、産業界		251	329	78	658
内、独法		306	348	88	742
内、大学		1182	1469	602	3253

筑波大、早稲田大、北陸先端大、東京工業大、兵庫県立大、横浜国立大、北海道大、山形大、九州大、岡山大、広島大 他



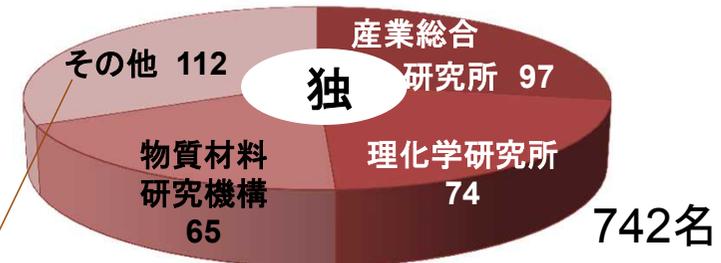
電力中央研究所、京都総合経済研究所、大日本印刷、構造計画研究所、凸版印刷、豊島製作所、アルゴグラフィックス 他

富士通、日立、NEC、東芝、パナソニック、村田製作所 他



トヨタ自動車、富士重工業、日産自動車、IHI 他

新日本製鐵住金、富士フィルム、東レ、住友化学、三井化学、デンソー 他



高輝度光科学研究センター、高度情報科学技術研究機構、科学技術振興機構、高エネルギー加速器研究機構、海洋研究開発機構、他

# (5) 体制構築-8 ～広報誌Torrent出版～

- ◆若手研究者の見える化
- ◆産官学の若手の橋渡し
- ◆社会へ活動成果アピール

- ・若手に取材を依頼し、交流を促進
- ・アウトリーチの意識向上！

若手とベテラン合宿レポート



若手研究者が取材

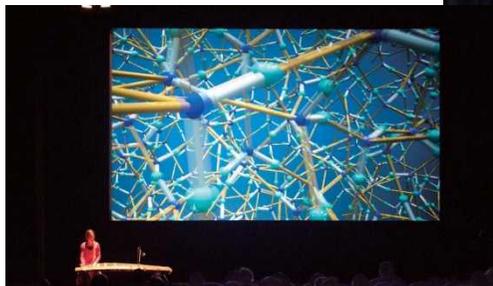


年に2～3刊発行



No.8 CMSI見える化シンポジウム開催特集

琴と計算科学映像  
のコラボ



東大理広報  
横山先生



NHK植松  
ディレクター

