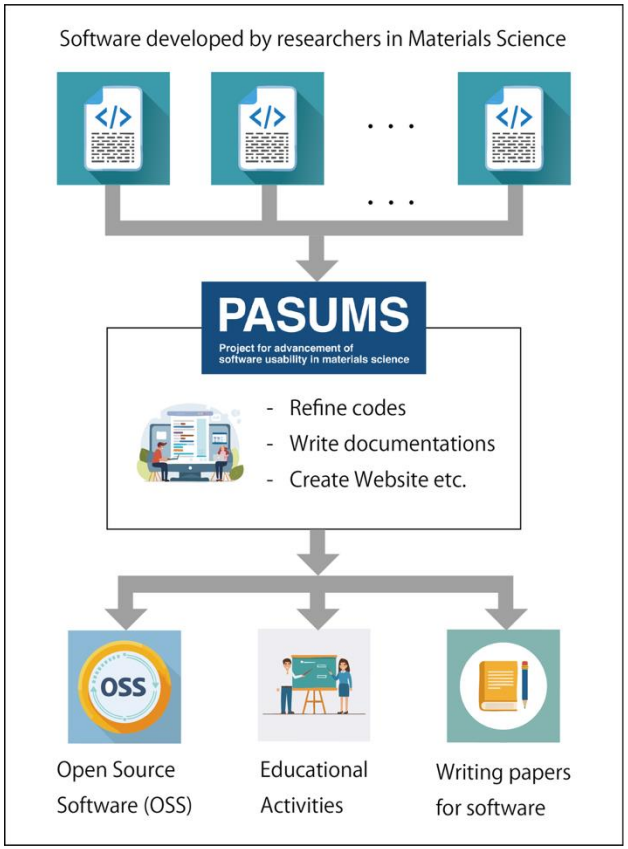
2026年度 東京大学 物性研究所 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト 公募説明会

東京大学 物性研究所

ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

2026年度の公募に関して



2025/11/7(金) 15:00-16:00
東京大学 物性研究所　吉見一慶

スーパーコンピュータ全国共同利用

<<スパコンの導入>>
1995年 初代スパコン
2000年 第二期のシステム
・・・
(5年サイクルで更新)
2015年 sekirei (システムB)
2018年 enaga (システムC)
2020年 ohtaka (システムB)

安定的な計算環境の提供
2000年以降、概ね95%を越える稼働率
500人規模の全国のアカデミック利用者
関連論文は毎年500編前後の出版
物性研スパコン パンフレット 2021年3月
https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/about-us

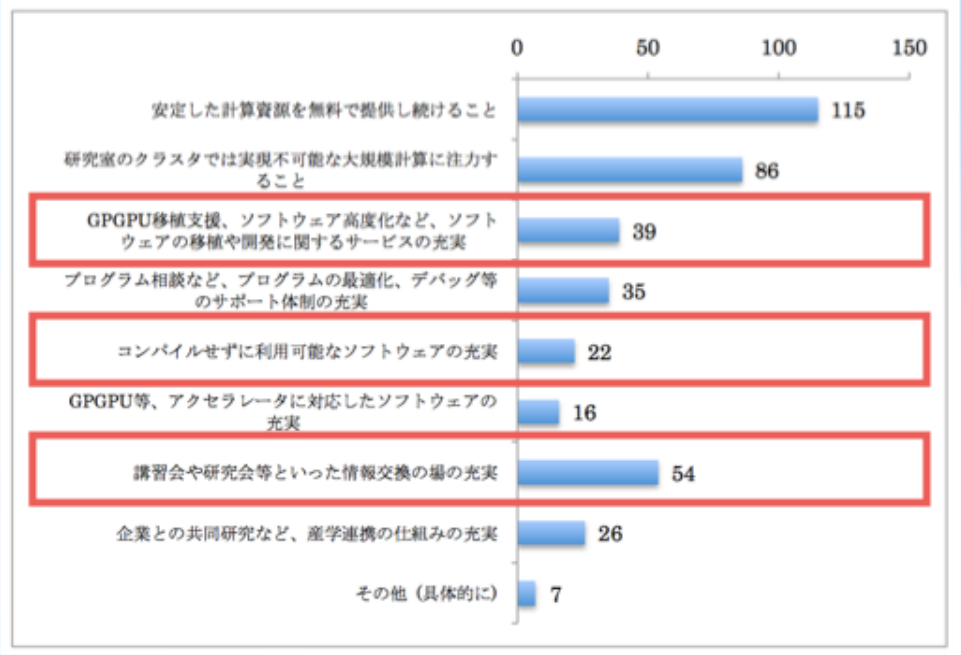
→ 最先端の大規模計算機を駆使した先端的な研究

その一方で・・・
ハードウェアの進化に伴った「並列計算の高度化・複雑化」
→ スパコンの利用にあたり、利用者に高いハードルを与えてしまう可能性。

ウェブアンケート結果

- 今後の物性研スパコンに望むことは何ですか？

物性研スパコンシステムに関するウェブアンケート調査(2015年度) より



- GPGPU移植支援、ソフトウェア高度化など、ソフトウェアの移植や開発に関するサービスの充実 (39/138)
- コンパイルせずに利用可能なソフトウェアの充実 (22/138)
- 講習会や研究会等といった情報交換の場の充実 (54/138)

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/about-us/issp-survey

ソフトウェア開発・高度化プロジェクト概要

学術的・社会的ニーズが高い、物質科学計算用ソフトウェアの開発・高度化
簡便なシミュレーション環境を物性研スパコン上に構築
全国共同利用スパコンユーザー層の底上げ

プロジェクト体制

吉見 一慶 (2015/4~)

本山 裕一 (2018/4~)

青山 龍美 (2022/5~)

◇ **2025年度実施メンバー（ 計5名 ）**
- ☆ プロジェクトマネージャ（デベロッパー兼） 吉見一慶
- ☆ デベロッパー　青山龍美、本山 裕一
- ☆ コーディネータ　物性研スタッフ（1名/プロジェクト）: 尾崎所員、川島所員

◇ **対象ソフトウェア**
公募で募集。物性研スパコン共同利用委員会による審査に基づき、年2件程度採用。
最終的にはオープンソースソフトウェア(OSS)として公開。

提案者・協力者

<応募時>
- ニーズ・目標・作業内容の説明
- OSSでの公開に対する同意

<プロジェクト時>
- 既存コード・実装内容の説明
- テスト協力、マニュアルチェック

ミーティング (隔週程度)

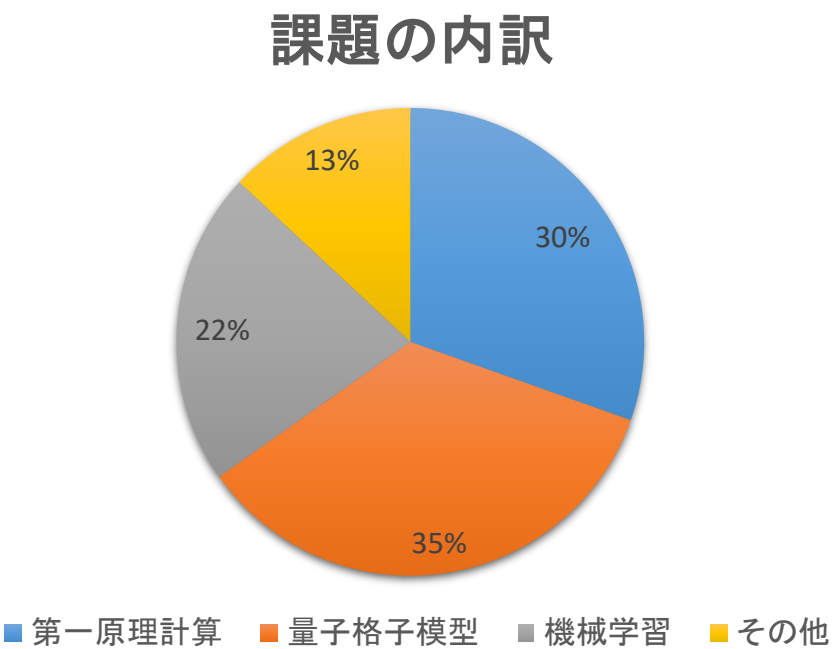
ソフトウェア開発・高度化

<審査時（物性研スパコン委員会）>
- ニーズ、将来性、実現性の検討

<プロジェクト時>
- スケジュール立案・管理
- 機能設計、コーディング、チューニング
- バージョン管理ソフト導入、マニュアル作成

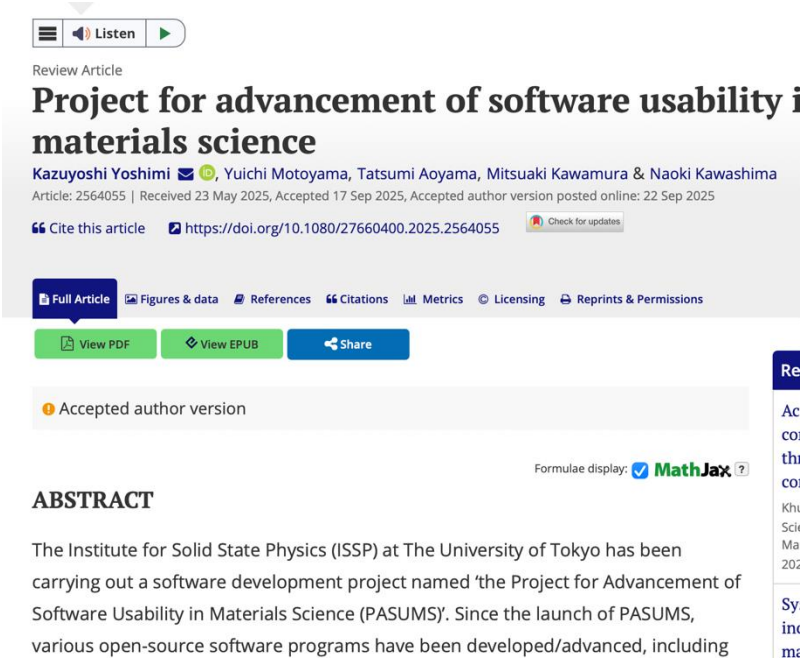
https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp

PASUMSで高度化されたソフトウェア一覧



物性分野の研究者と幅広い連携が可能
開発したソフトウェアに関する論文も執筆・出版

PASUMS論文 (Invited Review)



Listen

Review Article

Project for advancement of software usability i materials science

Kazuyoshi Yoshimi, Yuichi Motoyama, Tatsumi Aoyama, Mitsuaki Kawamura & Naoki Kawashima

Article: 2564055 | Received 23 May 2025, Accepted 17 Sep 2025, Accepted author version posted online: 22 Sep 2025

Cite this article https://doi.org/10.1080/27660400.2025.2564055 Check for updates

Full Article Figures & data References Citations Metrics Licensing Reprints & Permissions

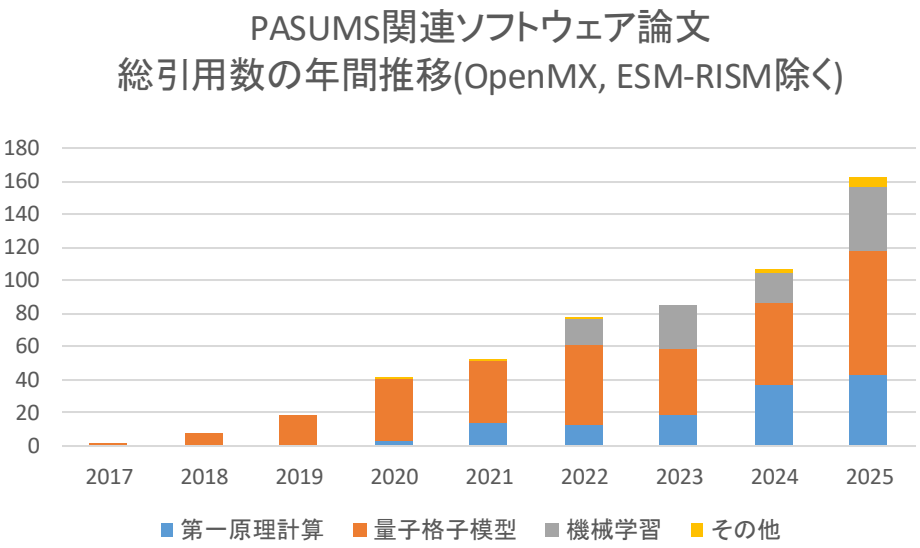
View PDF View EPUB Share

Accepted author version

Formulae display: MathJax

ABSTRACT

The Institute for Solid State Physics (ISSP) at The University of Tokyo has been carrying out a software development project named 'the Project for Advancement of Software Usability in Materials Science (PASUMS)'. Since the launch of PASUMS, various open-source software programs have been developed/advanced, including



Google Scholar 2025年11月6日 現在

- Yoshimi, K., Motoyama, Y., Aoyama, T., Kawamura, M., & Kawashima, N. (2025). Project for advancement of software usability in materials science. *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*. https://doi.org/10.1080/27660400.2025.2564055

提案者側のメリットは？

ソフトウェア公開作業

- ソフトウェア開発・高度化プロジェクトでは、ユーザビリティの向上を基軸に、マニュアルやインターフェイス、機能の整備・追加など行います。これらは、研究とは直接関係ない箇所も多くかつ労力も大きいため、ソフトウェアの公開に向けての大きな障壁となります。本プロジェクトを通し、これらの作業に関する支援を受けることができます。

ソフトウェア・ツール開発作業

- 数値ライブラリなど新規にプログラム設計・開発を行う場合には、提案者が設計の段階から参加し、テストの段階からユーザとして携われるというメリットがあります。また、ソフトウェアを公開するにあたっては、共同開発者としてのクレジットがつくという点も挙げられます。

研究会でのソフトウェアの宣伝

- 開発・公開されたソフトウェアについては、日本物理学会や各種研究会で発表をし、ソフトウェアの宣伝を行っています。これらの発表を通しユーザーと意見交換することで、ソフトウェアを活用した共同研究へと発展した事例もあります。

代表論文の執筆

- 新規リリースするソフトウェアについては、提案者・協力者の方々の合意が得られた場合には、共同でソフトウェアに関する論文の執筆を行っています。これにより、ソフトウェアを活用した研究の増加や、それに伴うコミュニティ形成の加速が期待されます。

Ref.) https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/application-faq

ソフトウェア高度化プロジェクトのライセンス

FAQページ の「5. 成果物のライセンスをGeneral Public License (GPL)ライセンス以外に設定出来ないのか？」に掲載。

- 本プロジェクトでは、物性研スパコンの普及に加え、物性計算科学分野に広く用いられるコミュニティコードとしての開発を行うことで、分野全般の振興に貢献することも目的としています。本プロジェクト後も継続的にコミュニティコードとして用されることを期待し、
  成果物がオープンソースライセンスであり続けること、
  派生物に関してもコミュニティコードとなるよう保障すること
  は重要な要素と考え、本プロジェクトの支援を受け開発した成果物はGPLライセンスにすることを原則としています。ただし、特別な理由がある場合には、協議の上、別ライセンスでの公開を認める場合があります。応募時、ライセンスに関して不明な点がありましたら、お問い合わせにある連絡先からご相談ください。

ライセンスをGPL以外に設定したソフトウェア

- **Kω (ライブラリとして利用する可能性が高いため、LGPLに設定)**
  - ライブラリを動的にリンクする形式であれば、配布時のライセンスをLGPLに設定しなくても良い。
- **PHYSBO (moduleをimportする可能性が高いため、MPLに設定)**
  - モジュールをimportして利用するだけであれば、配布時のライセンスをMPLに設定しなくても良い。

Ref.) https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/application-faq

2026年度の公募案内(1) 概要

募集プログラム数

- ソフトウェア高度化：1-2件
  - 工数見積もりの方法など、事前のご相談も可能です。
    ご不明な点がございましたら、
    center-dev@issp.u-tokyo.ac.jp
    までお気軽にご連絡ください。

スケジュール

11月7日 (金) 15:00-16:00
公募説明会

12月8日(月)
課題プログラムの公募締切

1月29日(木)
ヒアリング審査

2月初旬
ヒアリング審査結果連絡

https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/news/1890

応募上重視していること

プロジェクトの目的

- 物性研スパコン利用者の計算環境を大きく改善するソフトウェアを、翌年度春に物性研スパコン上でユーザーが無条件で自由に利用でき、かつ新規開発部分についてはコピーレフトを有するオープンソースソフトウェアライセンスの元ソース公開する。

プロジェクトの適用意義

- 「物性研スパコンの普及及びその利用の増進」への影響度
  - 開発後に見込まれる利用頻度，ソフトを利用して解決される課題の重要性など

実現可能性/具体性

- コーディング、ドキュメント作成、などの作業量や，ライセンス上の問題を考慮したうえで、年度内に終了するような実現可能な目標が具体的に設定されているか

応募文例: MateriApps Installer　提案者: 藤堂 眞治先生(2020年度)

https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/application-example

概要

- 国内外において、計算物質科学シミュレーションのための、高性能・高精度な手法・ソフト ウェアが数多く開発・公開されている。しかしながら、そのような公開ソフトウェアを試そうとしたとき、ソフトウェアのインストールそのものが大きな障害となることが多い。各人のPC の上で試す環境として、我々は MateriApps LIVE!の開発・公開を行ってきた。MateriApps LIVE!では、様々な物質科学アプリケーション、OS (Debian GNU/Linux)、エディタ、可視化 ツールなど、シミュレーションを始めるのに必要な環境は全て 1 本の USB メモリに収められており、講習会や講義などでも活用が進んでいる。MateriApps LIVE!を用いたローカル PC での試用計算の次の段階として、研究室の PC クラスター、物性研などの共同利用スパコン、HPCI システム、富岳へと順次、シミュレーションの大規模化を進めていくことになるが、その各段階でソフトウェアのインストール作業が必要となる。これらの共用のスパコンでは、各システム毎に CPU アーキテクチャや OS、システムソフトウェア、ライブラリなどの環境が大きく異なるため、あらかじめソフトウェアのバイナリパッケージを用意しておくことは現実的ではない。そのため、我々は、バイナリパッケージではなく、様々な環境に対応したインストールスクリプト集 MateriApps Installer の開発・公開を進めてきた。

(イ、ハ) プログラムの主な計算対象、計算に用いられる方法・原理

- MateriApps Installer 自体はインストールツールであり、何らかの特定の対象に対してシミュレーションを実行するものではないが、MateriApps Installer が対象とするソフトウェアのカテゴリは、密度汎関数電子状態計算から量子化学計算、分子動力学、強相関系・有効模型計算、可視化・モデリング、データ解析・補助ツールまで、全分野にわたる。また、対象とする計算機アーキテクチャ、OS は macOS、Linux (GNU コンパイラ、Intel コンパイラ)、富岳などである。

応募文例: MateriApps Installer　提案者: 藤堂 眞治先生(2020年度)
https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/application-example

(ロ) 物性科学上の重要性

- 研究者個人のノートPC から、富岳にいたるまで、同じバージョンの同じソフトウェアが利用できるようなシームレスな環境を実現することにより、シミュレーションの大規模化・高精 度化への障害が取り除かれ、計算物質科学分野全体の研究がより加速されると期待される。また、利用する計算機を選ぶ際に、ソフトウェアがインストールされているか(インストールできるか)を考慮する必要がなくなるため、必要な計算能力に応じた最適な計算機の選択が可能となり、計算機資源全体の利用効率も大幅に改善される。これまでの物性研高度化プロジェクトで採択されている HΦ、mVMC、DSQSS、DCore、OpenMX などについては、すでに対応済みであるが、本プロジェクトにより、今後も継続的なサポートを行うことが容易となる。

(ニ、ホ) 具体的な高度化の内容、優先度・作業日数の見積もり(単位あたり一人で換算)

- 1) マニュアル整備 [総計:作業日数 1 人×20 人日] 利用者用マニュアル(macOS、Linux、富岳)の整備を行う。また、開発者向けにソフトウェア追加手順書を整備する。
- 2) MateriApps LIVE!との連携強化 [総計:作業日数 1 人×20 人日] MateriApps LIVE! にインストールされているソフトウェアとのバージョンの整合性を確保する仕組みを構築する。基本部分を共通化し、半自動で整合性が取れるように機能拡張を行う
- 3) 2020 年度に導入予定の物性研スパコン新システムへのインストール作業の実施 [総計:作業日数 1 人×10 人日]
- 4) ソフトウェア間の依存関係を考慮する仕組みの導入 [総計:作業日数 1 人×20 人日]
- 5) CI ツールを導入し、スクリプトのテストを自動的に行う [総計:作業日数 1 人×10 人日]
- 6) その他 [総計:作業日数 1 人×10 人日] HPC 向けパッケージマネージャーSpack 用スクリプト生成機能や、Singularity などのコンテナの自動生成機能についての検討

応募文例: MateriApps Installer　提案者: 藤堂 眞治先生(2020年度)
https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/application-example

(へ) 各実装作業にあたり協力可能な作業

- ソースコードリポジトリを共有して実装作業を進める。富岳他へのインストールは、提案者・協力者がアカウントを取得し、テストを進める。実装方法や技術的問題などについて、定期的に情報交換を行い、必要に応じて修正しつつ協力して開発を進める。

<<作業日数に関する見積もりについて>>
各作業に対する優先度・作業日数の見積もりですが、提案者の方が作業する時間の２倍程度と考えると妥当な場合が多いです(第三者に実際の作業と見積もった時間の説明を行うと、より精度の高い見積が可能となります)。テスト作業の目安については、実装と同程度の日数が現実的な日数となる場合が多いです。また、作業日数はトータルで1人×100日(5ヶ月)以内を目安にしてください。

2026年度の公募案内 (2)

- 最近の活動
  - Newsに掲載(高度化ソフトウェアも含む)。
    - 論文、講習会、バージョンアップ、プリインストールなど。
- 応募関連
  - 応募文例
  - FAQ (高度化の内容、提案者側のメリットなど)
- これまでの高度化ソフトウェア
  - 「高度化ソフトウェアについて」の「高度化ソフトウェア一覧」に実施した内容などを課題ごとに記載。(各ソフトウェアHPへのリンクもあり)
- その他・お問い合わせ
  (作業見積もりへのコメント依頼など)

center-dev@issp.u-tokyo.ac.jp

へご連絡ください。

Ref.) https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp