

HPCI ソフトウェア賞の受賞について

物質設計評価施設 川島 直輝

大型計算機室、計算物質科学研究センターのメンバーが以下のとおり HPCI ソフトウェア賞を受賞しました。授賞式は 5 月 19 日に HPCI コンソーシアム総会に先立ってオンラインで行われました。賞の名称、対象団体名、対象プロジェクト名、受賞者は以下のとおりです。受賞者のみなさま、おめでとうございます。

■ 普及部門・最優秀賞 計算物質科学ソフトウェア普及チーム

➤ MateriApps プロジェクト/PASUMS プロジェクト

- 受賞者(MateriApps)：井戸 康太(物性研)、福田 将大(物性研)、笠松 秀輔(山形大学)、三澤 貴宏(北京量子情報科学研究院(現：物性研))
- 受賞者(PASUMS)：本山 裕一(物性研)、河村 光晶(東大情報基盤センター)、吉見 一慶(物性研)

■ 開発部門・最優秀賞 mVMC 開発者チーム

➤ ソフトウェア名：mVMC

- 受賞者：井戸 康太(物性研)、森田 悟史(物性研(現：慶應大学))、吉見 一慶(物性研)、本山 裕一(物性研)、河村 光晶(東大情報基盤センター)、Ruqing Xu(東大物理学専攻)、三澤 貴宏(北京量子情報科学研究院(現：物性研))

■ 開発部門・優秀賞 HΦ 開発者チーム

➤ ソフトウェア名 HΦ

- 受賞者：河村 光晶(東大情報基盤センター)、吉見 一慶(物性研)、三澤 貴宏(北京量子情報科学研究院(現：物性研))、井戸 康太(物性研)、本山 裕一(物性研)、山地 洋平(物材機構)

この賞は、一般社団法人 HPCI コンソーシアム(HPCIC)が「大規模計算などの計算科学分野の発展に貢献したソフトウェアのうち特に有益と認められたソフトウェアの開発者・団体、あるいは普及に貢献した者・団体を奨励するために」(HPCIC のウェブページより)設立した賞であり、若手研究者が授賞の対象となっています。これまで、ソフトウェア開発は、その応用としての学術論文によってのみ評価されてきていましたが、ソフトウェア開発

が高度化し、計算科学の黎明期と比較してはるかに専門性が高くなってきています。この賞の創設にあたっては、ソフトウェア開発自体にスポットをあてた評価が必要であるとの認識が背景にありました。今年度が第1回であり、特に記念すべき受賞といえるでしょう。この賞には、開発に対する賞だけでなく、ソフトウェア開発環境の整備や普及などの活動に対するものもあり、前者は「開発部門」、後者は「普及部門」として個別に審査されます。今回は、普及部門1件、開発部門5件(最優秀賞1、優秀賞1、奨励賞3)の合計6件に対して授賞があり、このうちの3件について物性研の若手研究者や開発時に物性研スタッフであった方々が中核的な役割を果たしています。

物性科学における計算科学は研究対象や計算手法の多様性から、研究者による多様なオリジナルコードが開発されてきましたが、物性研では、ソフトウェアの可用性を高めるためにいろいろな取り組みをしてきています。2013年に、物質材料研究で用いられるソフトウェアを紹介するポータルサイト MateriApps を立ち上げました。当初は、物性研が分子研、金研と協力して運営する体制でしたが、現在は、物性研の計算物質科学研究センターの事業として運営しています。現在で月間ページビュー数が2万件前後と、この種のウェブサイトとしては注目度の高いサイトとなっています。2015年からは、物質設計評価施設の事業として、公募によるソフトウェア開発・高度化プロジェクト(PASUMS)を推進してきています。このプロジェクトの眼目は、これまでおもに開発者とその周辺でしか利用されてこなかった優れたソフトウェアをできるだけ広い範囲の研究者に利用してもらうことであり、着実に成果をあげつつあります。今回は MateriApps と PASUMS の二つの取り組みに参加した若手研究者に対して普及部門最優秀賞が授与されました。

一方、開発部門の最優秀賞、および優秀賞は、ともに PASUMS 事業の対象となったソフトウェア開発・高度化に参加した若手研究者に対して授与されました。最優秀賞の対象となった mVMC、優秀賞の対象となった HΦ ともに強相関電子系のモデル計算に関するソフトウェアです。mVMC は変分モンテカルロ法と呼ばれる手法に基づくブ

