

東京大学情報基盤センター

トライアルユース利用成果報告書

提出日：平成 25 年 4 月 25 日

研究題目 (申込課題名)	大規模第 1 原理計算コード検証と並列化チューニング		
フリガナ 氏 名 (※1)	印	利用者番号 (プロジェクトコード)	
所 属 (※2)	株式会社アスミス	職 名	
利用計算機 システム	FX10 スーパーコンピュータシステム		
申込区分	1. 無償トライアルユース		2. 有償トライアルユース
コース	1. パーソナルコース (※3 コース 1 ・ コース 2)		2. グループコース 3. グループコース (企業利用)
利用期間	平成 24 年 4 月 ～ 平成 25 年 3 月		

- ※1 グループコースの場合は、利用申込書に記載した代表者名を記入してください。
- ※2 企業の方の場合は、企業名および部署名を記入してください。
- ※3 どちらかに○をつけてください。
- ※4 本報告書は、利用状況調査等に活用し、センター広報・Web ページには利用件数を公開いたします（グループコース（企業利用）を除く）。
- ※5 グループコース（企業利用）については、利用終了後に申込課題名および企業名をセンター広報・Web ページに公開いたします。

- 本報告書は、利用期間終了後 1 ヶ月以内に東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チームまでご提出ください。
- 本様式の変更はできません。

受付日	平成 年 月 日	受付印	
-----	----------	-----	--

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。

1. 利用の概略
1) 利用目的・内容 第一原理バンド計算プログラム PHASE の開発、デバッグ。
2) 利用意義 当社独自で多くの CPU コアを準備することは難しく、大規模もしくは高並列のケースで発生する不具合などの対応に利用意義がある。
3) スーパーコンピューターを利用する必要性 通常のパソコンやクラスターでは対応しきれない、大規模な系の解析を実行したい場合に必要。
2. 成果の概要
1) 今後得られるであろう成果の見通し 上述の PHASE プログラムが、特に大規模系の計算において現状よりもロバストなコードとなることが期待できる。
2) 社会・経済への波及効果の見通し ※パーソナルコースを利用された企業の方およびグループコース（企業利用）の場合のみ記入 直ちに波及効果は見えないが、シミュレーションを活用しようとする動きは活性化してきている。材料関連でも基礎研究ではシミュレーションが活用されており、長期的には社会に貢献できると考えている。
3) その他の成果 特になし。

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。