計算科学ロードマップの 編集状況報告と パブリックコメント反映(案)

2013年9月17日 第9回アプリFS全体ミーティング 富田浩文・杉田有治・事務局 (協力) 三菱総研

報告2点

- ・ロードマップ本体の公開への動き
 - 9月中に完全公開(絶対ライン)
- ・パブコメ結果の対応方針
 - 多少摺合せ

- パブコメ結果のロードマップへの反映は、少なくと も12月中。

8月30日版からの主な更新点(1)

- ・ 執筆者の確認結果のコメント(38件)への対応
 - 誤記修正、誤字・脱字修正
 - 参考文献対応
 - 用語集 などなど

• 内容追加

- 1章の追加(以前のバージョンから抜粋して作成)
- 2~4章への計算機要求の表の追加
- 2章、3章への概要版の図の追加
- 4.4.6項(可視化・データ処理)への図(小野先生ご提供)の追加
- 4.6節(社会科学)の追加
- 用語集の追加
- 執筆者リストの追加

8月30日版からの主な更新点(2)

• 内容変更

- 4章の一部(4.4.2構造解析、4.4.3機械材料、4.4.5電磁界解析)のロードマップの更新
 - 4.5.1宇宙研究、4.5.2素粒子は2022年以降の扱いについて確認中
- 参考文献引用箇所の明記(執筆者からの情報)
 - まだ執筆者確認中の節・項が一部あり

• 体裁統一

- 参考文献の文中引用方法が(人名、年)形式と[1]形式が混在していたものを、全て[1]形式に統一
- その他、体裁面の微修正多数
 - xと×の統一、半角・全角、英略称とフルスペルの順序、など

ロードマップ本体

- メンバー用ページに掲載されている。
- 本日後、公開予定、であったが、
 9月末にパブコメ対応予定と同時に公開予定に する。
 - 対応すべきは、早急に依頼(すでに案はまとめている)
- ・以上が絶対のデッドライン:これ以上遅れることは避けたい
- 要求性能については、現時点のラフ見積もりであることを明記のうえ、今後、精査してupdateしていく。

8月30日以降の指摘事項とその対応状況

(諸先生方の指摘に対する事務局+MRIでの対応)

No.	ページ/章節項	指摘日	指摘者	指摘内容	対処内容	処置者	処置日
1	3.1.3項	9月5日	山下(池口)	編集からの言い換え提案に対する再変更提案	ご提案の通り修正	MRI (内田)	9月5日
2	69ページ12行目	9月6日	池口	"可視化レーザー"を、"可視光レーザー"に修正してください。	ご指摘の通り修正	MRI (内田)	9月6日
3	17ページ	9月6日	池口	"J-Parc"は"J-PARC"が正式だと思います。	ご指摘の通り修正	MRI (内田)	9月6日
4	6ページ17行目	9月6日	池口	誤:以上の量子 化学計算(FMO)で求められる計算スペックの 詳細は、4.1章を参照いただきたい。 正:以上の量子 化学計算(FMO)で求められる計算スペックの 詳細は、4.2章を参照いただきたい。	ご指摘の通り修正	MRI (内田)	9月6日
5	65ページ	9月6日	理研∙三沢	1 千万 × 2 塩基 × 2 千人 (演算子のかける×)となっていたところが1 千万 × 2 塩基 × 2 千人 (アルファベットのエックスx)になっています。 演算子の×の方は環境依存文字なので×で代用することも少なくないですが、文章の他のところを見ると演算子の×を使ってるようなので、もし可能なら演算子の×の方にお戻しいただいた方がよいかと思います。	ご指摘の通り修正 他の部分についても全て「×」に統一	MRI (内田)	9月6日
6	62ペーじ	9月6日	理研·三沢	「ゲノムワイド関連解析である。」と「関連解析とは」の間に原稿にない改行が入っています。この改行はあってもなくてもどちらでもOKと思いますが、次のことと関連して気になりました。		MRI (内田)	9月6日
7	66ペーじ	9月6日		白紙のページが一つあります。上述の改行を一つ減らすことによってここの白紙ページを一つ減らすことが可能かと思います	改ページ位置は調整済み	MRI (内田)	9月6日
8	4.4.2	9月6日			2つ目の課題を延長した図を挿入	MRI (内田)	9月6日
9	4.4.3	9月6日	高木	ロードマップ:とりあえず、2015年は2015年付近ということで対応して下さい。	編集版を作成し、確認を依頼→17にて回答	MRI (内田)	9月6日
10	4.4.5	9月6日	高木	ロードマップ: 課題を延長して下さい	課題を延長した図を挿入	MRI (内田)	9月6日
11	4.4.3	9月6日	高木	本文の差し替え(参考文献引用)	[4]の引用について再確認→13にて回答	MRI (内田)	9月6日
12	3.2.2	9月6日	石川(洋)	図の差し替え(チェックポイント法)	ご提供の図に差し替え	MRI (内田)	9月6日
13	4.4.3	9月9日		[4]の引用について、[3,5]のところに含まれていますので、[3-5]として下さい。	反映済み	MRI (中村)	9月12日

14	3.2.2	9月9日	石川(洋)	3.2.2について問題なし。	対処不要	-	_
15	執筆者リスト	9月9日	秦	執筆者リストも頂きましたので、全体の表に入れました。 あとは社会科学だけ	本編に追加	MRI (中村)	9月12日
16	用語集	9月9日	高木	用語集の「4.4ものづくり」部分を全て埋めて頂きました	マージ版に反映	MRI (中村)	9月10日
17	4.4.3	9月9日	高木	ロードマップ修正について確認。	対処不要	_	_
18	4.1	9月10日	池口	・P83, P87の「350万サンプル」は「280万サンプル」に変更してください。 ・P5の「350万サンプル」は「280万アレイ」に変更してください。 ・P87の「現在の5倍ほど」は「現在の3倍ほど」に変更してください。	指摘の通り反映 「280万アレイ」への修正は性能要求表にも反映(概要版	MRI (中村)	9月10日
19	4.1	9月10日	池口	以前4.1.2だったところはリストが無いが、それでよいか? →これは私がマージしたので、たぶん大丈夫だと思います。 4.1.2の担当の人からも問題点は指摘されておりません。	対処不要	_	-
20	4.1	9月10日	池口	「三経形態抽出」は「神経形態抽出」の誤り	反映済み	MRI (中村)	9月10日
21	用語集	9月10日	堀	1磁場散逸時間:磁場を作っている電流が電気抵抗により熱に変わること(ジュール散逸)によって、磁場が指数関数的に減少する典型的時間。	用語集に反映	MRI (中村)	9月10日
22	用語集	9月10日	堀	p.8とp.156:「セグメント境界の位置」→「水平方向の広がり」	本編に反映	MRI (中村)	9月10日
23	4.4.1	9月10日	堀	8/30バージョンをお渡ししたところ、添付のようなコメントが寄せられた	全体に関わるコメントもあるため、富田さんが確認予定 「不測性能」→「不足性能」のみ修正		、松岡浩さん たさん調整?
24	2.2	9月10日	堀	2章の要求性能の表ですが、添付のようにメモリとHDDの値を 有効数字1桁にさせて下さい(内容としての変更はありません)			
25	4.4.5	9月10日	高木	4.4.5 引用文献 4.4.1,4.4.2については断念。	4.4.5について反映	MRI (中村)	9月10日
26	4.2	9月10日	藤堂	・リンク切れとなっている ATAT の URL は http://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw /atat/ に修正して ください。 ・参考文献は一般的なものばかりなので、特に本文中での引用は不要かと思います。	ATATのURLについて反映	MRI (中村)	9月10日
27	2.3	9月10日	秦	2.3 節については、高木先生と藤堂先生からコメント対応いた だきました。 のこり、河宮先生担当分をいまお願い中です。	No.31にてコメント対応版受領	-	_
28	3.1.2	9月10日	林	原稿の修正はありません。	対処不要	_	_
29	用語集	9月10日	林	【素過程(そかてい)】 複雑な自然現象は、様々な物理(電磁気学、熱力学、流体力学、…)が絡み合って生じている。しかし、少くない現象においては、関わる物理をいくつかの構成要素に分割して、その要素間の相互作用として記述することが可能である。そのような構成要素のうち、特に、基本的な物理で比較的単純に数学的に表現することができるものを素過程という。たとえば、流体力学で支配される移流(力学)過程、放射伝達方程式で支配され		MRI (中村)	9月10日

30	4.3.1	9月10日	河宮	4.3.1確認しました。問題ありません。 ※ 図や文献リストの引用について返事がなかったので、再 度確認中。	文献リストの引用について → No.32	-	-
31	2.3	9月11日	河宮	2.3エネルギー…のコメント対応版と、4.3.1気象…の原図を 河宮先生より頂きました	2.3の変更部分を反映	MRI (中村)	9月12日
32	4.3.1	9月11日	河宮	引用を番号を文中にとのことでしたが、メンバー用ページからはPDF版しかダウンロードできず、修正を施すことができません。引用番号の付加には、内容に対する理解が必要ない部分なので、この辺の対応は事務局にお願いできると大変ありがたいのですが、いかがでしょうか。	対応困難な旨を打診 → No.38		
33	用語集	9月11日	秦	用語集の固体地球部分、理研が対応したファイルを送付して いませんでした。このメールに添付いたします。	用語集に反映	MRI (中村)	9月11日
34	用語集	9月12日	秦	「固体地球」その他について受領。 4.2の「サイト」について確認を依頼。	「サイト」以外は完了	MRI (中村)	9月12日
	4.4.6	9月12日	秦 (小野)	小野先生より、「4.4.6 可視化・データ処理」に入れる図をいただきました。 添付のPDFの黄色と緑色のマーカー部分に添付の図を参照してください。 キャプション: 分子シミュレーションの並列レイトレーシング画像 並列分散可視化システムの概念設計	本編に反映	MRI (内田)	9月13日

35	2.3	9月13日	藤堂	・コメント[4]: 該当箇所を以下のように修正お願いします。 電気・光学・磁気特性それぞれ単独の機能性だけでなく、光と電子のダイナミクスが密接に絡み合って生まれる新しい機能性が計算科学により明らかにされること似より、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイスや量子データ転送素子の開発などにつながる理学・工学の新たな研究領域を切り開くことが期待でき、その学術的意義は非常に高い。 ・コメント[7,8]: 該当箇所を以下のように修正お願いします。気象・気候、ものづくり分野における代表的な意見も必要であれば追加お願いします。> 河宮様、高木様 上記課題についてのコミュニティからの意見の詳細は、第4章(4.2, 4.3.1, 4.4.1, 4.4.4など)を参照されたい、代表的な意見としては、J-Parc、SPring-8、Saclaといった大型実験施設との連携、元素戦略(磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野)における計算科学からの貢献、コミュニティーソフトウェアの整備への期待などが挙げられる。	本編該当箇所を修正	MRI (中村)	9月13日
36	2.4	9月13日	秦	総合防災の要求性能表がFIXしたので反映してほしい。	本編、概要版ともに反映済み	MRI (中村)	9月13日
37	4.3.2	9月13日	秦 (堀)	4.3.2の要求性能表の(i) については、総合防災の全ての項目が対応するそうです。コピペして置き換えてください	要求性能表を修正	MRI (中村)	9月13日
38	4.3.1	9月13日	秦	4.3.1の引用文献は理研で作成し、河宮先生に確認中。理研作成版を反映してほしい。	反映済み	MRI (内田)	9月13日

未対応部分

- 図を入れる(キャプションも)
 - 4.2 物質科学(藤堂)、4.3.2 固体地球(堀)、4.4.5 電磁界解析(高木)、4.6 社会科学 (伊藤)
 - 今日明日中にほしい。(9月末公開に間に合わない)
- 要求性能表
 - 4.4.6 可視化・データ処理 ... 他とフォーマット違う
 - ここは、問題にデペンドなので特に必要なし?
- 執筆者一覧
 - 4.6 社会科学(伊藤)
 - 今日、この場でもらう。
- 参考文献引用番号
 - 4.3.1 気象・気候、4.5.1 宇宙、4.5.2 素粒子 … 全て修正版を受領済連休中送られてきたため、まだ反映されていない。今日明日中に反映します。
 - 参考文献がないところ:
 - 固体地球 : 乗せるか載せないか? 乗せるとしたら、どのぐらい時間かかるか?(堀)
 - 熱流体、構造解析、電磁界解析: 断念? (高木)
 - 社会科学 : どうするのか? 乗せるとしたらどのぐらい時間かかるか? (伊藤)
- 用語集
 - 3.1.1 基礎物理:「フェルミオン」「ボソン」「バリオン」の解説 ... 理研案もある(中村一石川摺合せ)
 - 4.2 物質科学: 「サイト」2箇所 ... 要確認 3章に出てくるサイトは部位に置き換え。 4章に2か所サイト(p.142,p.140)が出てくる。違う意味で使われているのなら、どちらも記載する必要あり。(藤堂)

ここまで、短期でご協力ありがと うございました。 引き続きよろしくお願いします。 事務局

「計算科学ロードマップ 概要」に関する意見募 集(パブリックコメント)について

- 1. 意見募集の概要
 - 受付期間: 平成25年7月19日(金)~平成25年8月16日(金)17時
 - 対象となる文書:「計算科学ロードマップ 概要
 大規模並列計算によるイノベーションの目指す社会貢献・科学的成果~」 http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/document/pubcom/hpci_roadmap_abstract.pdf
- 宣伝活動:
 - 7月19日の受付開始と共に、プレスリリースを発信。 http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130719_1/
- (以下は発信先)
 - 科学記者会、科学記者会、大阪科学・大学記者クラブ、兵庫県政記者クラブ、神戸市政記者クラブ、神戸民間放送記者クラブ、関西プレスクラブ
 - 記事とならなかったため、「計算科学ロードマップ」執筆関係者の所属する組織や各分野の学会等の団体宛メーリングリストに発信して宣伝した。
- →ご協力頂いた先生方、ありがとうございました。

2. 意見募集の結果

- 件数: 応募件数は全部で29件。(人数で見ると23名。別紙にグラフ化。)
- 内容: 別ファイルの一覧表参照
- 回答内容: あくまでFSとして回答。別組織で議論されているものは参照 促す。
- 大きく、以下の5項目に分けて整理した。
 - A:文書への反映は不要
 - B:対応要検討(可能な範囲で)
 - C:対応すべき
 - D:指摘の通り反映する
 - E: 「はじめに」または「おわりに」に言及
- 回答の方法: 意見に対する回答をまとめ、Web上で公開予定(9月末までに)
- その際、「ロードマップ白書」の本編(9月版)も同時に公開する予定。
- ※「パブコメの意見を反映した「ロードマップ白書」の最終版は、今年度 末に公開する(アプリプロファイルの精査は早急に)

パブコメに対する対応

- 対応一覧:
 - メンバー用ページに載せてあるので、見てください。

話し合い事項

- 細かいところは、各分野で対応?
- 総合防災に集中豪雨課題を入れるということでよいか?
- メタ話(今後のHPCの在り方、人材育成、プログラミングモデルなど)をどこか(はじめに、終わりに)に入れ込むか?
 - FSの範疇ではないところは、他のWGの活動を紹介しておく?
- 合意が取れ次第、これも掲載。
- 今後、これを反映し、ロードマップは年内フィックス:
 - 確認および修正デッドライン:9月末
 - ただし、要求性の数値は、現時点の推定になっており、今後、実測により、より精査したものを随時載せる。