

物質科学分野の修正状況 (1/4)

- 4.2 物質科学

- 主な変更点

- いつの時点からか章立てがおかしくなっていたので修正
 - (4.2(4)と4.2(5)をマージして整理)
 - 明らかな間違い ⇒ 修正
 - 専門用語の説明
 - 基本: Wikipedia (日本語版)に載っている単語はそのまま
 - 特に難しいものは言い換え or 括弧書きで説明を追加
 - リファレンスを何点か追加

物質科学分野の修正状況 (2/4)

- 変分モンテカルロ法(強相関電子系で重要なアプリ)に関する情報を追加
- もともと入っていたアプリ性能要求の一覧表はアップデートされていなかった
ので削除
 - 理研側でまとめている表で一括管理
- 4.2(3)「次世代に解決すべき課題」の各項から、4.2(4)の対応するアプリへの参照を追加
- 4.2(5)「他分野との連携」に実験との連携(特に大規模実験施設)、他の基礎物理分野、生命科学分野、ものづくり分野との連携を記述

物質科学分野の修正状況 (3/4)

- 査読コメントに対するコメント
 - コメント:ロードマップでは要求性能はほぼすべてのもので1EFLOPSを想定しているが、単に計算機の性能を評価しているものとも読み取れる。
 - 「ほぼすべてのもので1EFLOPSを想定している」はその通り。先に我々のやりたいこと/やらなければならないことの総演算量がある。具体的な計算機要求に落とすためには、理論ピーク性能、理論バンド幅、あるいは総演算時間などのうちどれかの値を仮定(固定)することが必要。(総演算時間を24hに固定して、必要なFLOPS値を算出することも、多くのアプリについてももちろん可能) どの値をどのように仮定するのかについてはFS全体のコンセンサスはなく、個々のアプリ毎に異なっているのが原状。

物質科学分野の修正状況 (4/4)

- 査読コメントに対するコメント
 - 「ネットワークバンド幅」について
 - 単にバイセクセクションバンド幅で良いのか？より高次元のネットワークが要求される場合にはどう記述すれば良いのか？定義が人(性能見積りを行った人、査読者)によって異なっている。FS全体ではどのように定義するのか？