

2023 年 10 月 12 日

「計算物理領域」提案書

計算物理領域準備会

代表 岡本祐幸

(1) 発起人リスト

合計 50 名のリストをこの提案書に添付しました。

(2) 領域タイトル

計算物理

(3) 提案趣旨

計算物理 (Computational Physics) という物理学の全分野に関わる研究分野があります。この分野は 1940 年代に電子計算機が発明されてから始まった比較的新しい研究分野です。ハードウェアの日進月歩の発展と 1953 年のモンテカルロシミュレーション法の開発から始まった計算手法の目覚ましい発展により、予測能力の画期的な向上が得られ、現在では、実験と理論と鼎立する物理学研究の 3 つ目の柱として確固たる地位を占めています。

計算手法自体の進歩発展が多くの分野で著しい現在、この物理学の全領域を横断する計算機に基づく研究を集中的に扱う「計算物理」領域を新設し、さまざまな分野間での情報流通を促進することは、会員の大会・年会での発表の選択肢が広がるだけでなく、物理学全体の発展に大きく資するものと考えます。特定の物理系への応用などは関連する領域で発表・議論されるでしょうが、対象とする物理系に依らない手法の研究は、新領域で発表されて分野・領域をまたいだ議論が活発化されるでしょう。また、この多様な計算物理の根幹が物理学の基礎研究にあり、物理学の基礎研究こそが新しい方向性を生み出す駆動力となっているという強いメッセージを世間に向けて発信することもできるでしょう。それによって、物理学会の求心力が高まり、会員増に寄与することも期待できます。以上、会員のメリット、物理学全体の発展への寄与、学会の外に対するメッセージ発信の強化という観点から新領域設置を提案します。

私達の提案理由は主に以下の 3 つです。

1. 物理学研究の発展のため

計算物理は計算手法という物理学の全領域を横断して共有されるものに基づいています。普段はほとんど交流のない研究者が情報交換することによって、既存の分野を活性化する可能性を持っており、既存領域が経糸であるとする、計算物理は緯糸を担っていると言えます。この両方の連携が必要だと私達は考えます。具体例を挙げれば、素粒子論や物性物理学の分野で開発された拡張アンサンブル法というシミュレーション手法が生物物理学の分野に導入されて、後者の分野を大発展させてきましたが、特に、(レプリカ) 交換法は日本で開発された手法であり、それを生物物理学や化学物理学の分野に導入して、それらの分野の標準的な

シミュレーション手法にしたのも日本からの論文でした。同じ日本からの発信なのに、両者には日本での交流がほとんどなく、海外で開催された計算物理の国際会議での交流によって成し遂げられた成果でした。これらの違う分野の研究者が日本物理学会で普段から交流できるようにしたいというのが、私達が望むことです。

2. 日本物理学会の国際的地位を保つため

国際純粋・応用物理学連合 (International Union of Pure and Applied Physics: IUPAP) には、20 番目の Commission として、Computational Physics があります (1996 年創設)。また、米国物理学会 (American Physical Society: APS) には、Division of Computational Physics (DCOMP) という領域があります (1986 年創設)。更に、欧州物理学会 (European Physical Society: EPS) には、Computational Physics Group があります (1972 年から活動開始)。しかし、日本物理学会においては、計算物理に関わる研究者が少なからず存在するにもかかわらず、IUPAP や APS や EPS の Commission や Division や Group に対応する研究領域が未だにありません。アジアでは、大分遅れましたが、とうとう 2020 年秋に、アジア太平洋物理学会連合 (Association of Asia Pacific Physical Societies: AAPPS) に計算物理領域を創設する動きが出たのと、会長 (当時) の横山順一氏から計算物理領域準備会に相談がありました。横山氏は、AAPPS には、物性物理、宇宙物理・宇宙論・重力、核物理、プラズマ物理などの領域があるが、これらの領域は全て、日本物理学会の会員が中心になって作ったものです。計算物理領域も日本物理学会の会員がリードして創設して欲しいという趣旨のことを言われました。「2 番では駄目なのでしょうか？」となってはいけないということです。幸い、計算物理学の分野では、CCP2023 の成功を見ても分かるように、アジアでは日本の研究者の幅広さ、層の厚さ、業績において圧倒的な存在感を示しています。この国際的地位を確固としたものとするために、できるだけ早く、日本物理学会に計算物理領域を創設することを望みます。

3. 関連学協会で成果発表するデータ科学や量子計算の研究者を物理学会に呼び込むため

京から富岳へと続くスーパーコンピュータ、理研の量子コンピュータ、日本発の量子アニーリング法、人工知能・深層学習によるデータ科学的手法の普及など、物理学会に関連する研究が今さまざまな方向にさまざまな分野で急拡大を見せており、世間でも大きな注目を浴びています。機械学習やデータ科学はそもそも物理学の統計物理の分野 (スピングラス研究など) から始まり、やがて物理学を越えて情報科学の分野に広まっていったものであり、近年、その予測能力が劇的に改善して、物理学、化学、生物学、薬学、工学ばかりでなく、ChatGPT に代表されるような生成 AI が一般の社会生活に大きな影響を与えるようになってきています。量子計算が大きく注目されるきっかけとなった量子アニーリングも、計算機を用いたスピン系の研究から始まっています。こうした新しい動きの基盤は計算物理が

築いてきたことを再認識し、計算物理という研究手法を切り口とした領域を新設することで、外部から新たな参加者を呼び込むことができれば、日本物理学会の活性化につながるという大きなメリットがあります。このことは、日本物理学会における既存領域の一体性を損なうことなく可能であると信じています。

私どもは日本物理学会に「計算物理領域」を作るために、2018年から活動してきました。これまでの私達の活動を簡単に説明させていただきます。まず、2019年3月の物理学会年次大会で、8つの領域（素粒子論、理論核物理、宇宙線・宇宙物理、領域1、領域2、領域9、領域11、領域12）を横断する「計算物理学への誘い」という合同シンポジウムを開催し、約130名の聴講者を得ました。続けて、同会場で、約100名の参加者を得て、第1回「計算物理インフォーマルミーティング」を開催しました（以後、毎年年次大会または分科会で開催しています）。ここで、「計算物理領域準備会」を発足させ、新領域発起人を募り始めることを決議しました。そして、計算物理領域準備会のホームページ (<https://sites.google.com/view/compphys-jp>) を作ると共に、メーリングリスト COMPPHYS-JP を立ち上げました（メーリングリストのメンバー数は現在165名です）。2021年3月の年次大会の「計算物理インフォーマルミーティング」では、上述のように、AAPPSに「計算物理領域」を作る動きが出てきて、日本物理学会に「計算物理領域」がないので、代わりに「計算物理領域準備会」が協力することを決議しました。また、毎年開催されている IUPAP Conference on Computational Physics (CCP) を日本へ招致することを決議しました（2年半後の2023年8月に CCP2023 (<https://ccp2023.jp>) を神戸で433名の国内外からの参加者を得て好評のうちに開催を終えました。日本からは15件の招待講演に加え、口頭発表は72件、ポスター発表は136件ありました）。更に、計算物理領域準備会メーリングリストの若手メンバーが中心になって、2023年3月に「計算物理春の学校2023」を開催し、機械学習、量子計算、素粒子物理、物性物理の分野の講師が講義を行い、100名以上の大学院生や博士研究員などの参加を得ました。

以上の活動を通じて、2023年3月の計算物理インフォーマルミーティングでは、計算物理領域準備会が、日本物理学会に「計算物理領域」の新設を提案することを決議しました。

(4) 最近1年以内の大会講演からの100件以上の講演

2023年3月の日本物理学会春季大会から抽出した「計算物理領域」関連の151件の講演リストを、この提案書に添付します。講演の概要は以下のURLからダウンロード可能です。

<https://app.box.com/s/lt8pvgg8c01ceapuf4hc75in0olvfr4z>

(5) 領域設置の場合

(5a) 現行のどの領域から各何件程度の講演を委譲することになると予想されるか

当面、領域をまたぐ合同セッションを中心とするため、既存領域から完全に委譲される講演数はそれほど多くなく、合計で 30 件程度と見込まれます。内訳は領域 1 と領域 11 からそれぞれ 10 件、それ以外の領域からはそれぞれ 1, 2 件程度と考えます。

(5b) 現在の物理学会外から何件程度の講演を学会に呼び込むことになると予想されるか

CCP2023 における日本物理学会会員以外による日本からの発表数から、約 20 件と見積もります。

(6) 物理学会以外に関連の深い学会・国際会議があれば、設立予定のものも含めて列挙する

- CCP: IUPAP Conference on Computational Physics (<https://ccp2023.jp/>)
- SC: The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (<https://supercomputing.org/>)
- ISC: International Conference on High Performance Computing, Machine Learning, Data Analytics, and Quantum Computing (<https://www.isc-hpc.com/>)
- APS DCOMP: American Physics Society, Division of Computational Physics
- EPS CPG: European Physical Society, Computational Physics Group (<https://www.eps.org/members/group.aspx?id=85228>)
- AAPC: Asia Pacific Physics Conference of AAPPS (<https://www.jps.or.jp/APPC12/>)
- 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会 (<https://www.ipsj.or.jp/kenkyukai/event/hpc188.html>)
- 情報処理学会量子ソフトウェア研究会 (<https://sigqs.ipsj.or.jp/>)
- 人工知能学会 (<https://www.ai-gakkai.or.jp>)
- 電気情報通信学会 QIT 量子情報技術研究会 (<https://www.ieice.org/es/qit/>)
- IBISML 情報論的学习理論と機械学習研究会 (<https://ibisml.org/>)
- SWoPP 並列／分散／協調処理に関するサマー・ワークショップ (<https://sites.google.com/site/swoppweb/>)
- 天文学会 (<https://www.asj.or.jp>)
- 応用物理学会 (<https://www.jsap.or.jp>)
- 分子シミュレーション学会 (<https://www.mol-sim.jp>)
- 生物物理学会 (<https://www.biophys.jp>)
- 化学会 (<https://www.chemistry.or.jp>)
- 薬学会 (<https://www.pharm.or.jp>)

(7) その他根拠資料

運用素案

以下のキーワードを元に学会発表プログラムを編成します。

第一キーワード：高性能計算、計算アルゴリズム、データ駆動科学

第二キーワード：

(高性能計算関係) 高性能計算、大規模計算、計算機ハードウェア、プログラミング言語、ソフトウェア開発、並列化、GPU

(計算アルゴリズム関係) 計算アルゴリズム、最適化、モンテカルロ法、分子動力学法、第一原理計算、密度汎関数法、量子多体系シミュレーション、連続体シミュレーション (有限差分法、スペクトル法、有限要素法)、超粒子法、変分法、固有値問題、テンソルネットワーク、量子計算アルゴリズム、量子シミュレーション、量子誤り訂正、量子古典ハイブリッド

(データ駆動科学関係) 機械学習、深層学習、量子機械学習、大規模データ解析、インフォマティクス、可視化

第三キーワード：(大まかな既存分野の分類)

素粒子・原子核、宇宙線・宇宙物理、ビーム物理、物性物理、その他

プログラム編成については以下のように考えております。

- 当面、年会（素核＋物性）のみセッションを設ける（分科会については、物理学会の学会開催方針を見ながら、適宜検討する）。
- 当面、領域をまたぐ合同セッションを中心とする。大きく高性能計算、計算アルゴリズム、データ駆動科学に分けてセッションを構成。それぞれについて関係する領域との合同セッションとする。（募集のやり方や、具体的なプログラム編成については、プログラム委員経験者を含めた検討が必要。）
- （少なくとも当初は毎回）希望する領域との合同シンポジウムを企画する（プログラム編成の複雑さが懸念される領域は、その解消のメドが立つまでは、無理をしない）。

以上。