

## 【用語解説】

### \*1 材料計算

物質・材料開発のための計算機シミュレーションのこと。近年、シミュレーションやデータ科学を用いることにより、新物質・新材料開発を加速しようという研究・開発がなされている。または、量子化学計算と呼ばれることもある。背景として、「京」や「富岳」コンピュータを代表とする大規模高並列化計算機や計算手法の発展があり、現実に近いシミュレーションができるようになったことが挙げられる。また、近年、進展が著しい量子コンピューティング技術をどのように物質材料探索に活用していくかの検討も重要課題と位置付けられています。（[計算物質科学協議会](#)のサイトから一部抜粋）

### \*2 第一原理シミュレーション

基礎物理定数以外の実験値に依存しない量子力学に基づいた計算手法のこと。第一原理シミュレーションを行うことにより、実験合成に先立ち物質の性質や特性を予言・解析することができる。そのため、実験的に直接観測が難しい解析や、新物質探索などへの活用が期待されている。

### \*3 高速フーリエ変換

フーリエ変換を計算機上で高速に計算するアルゴリズムである。フーリエ変換は、与えられた信号をいくつかの周波数成分に分解する手法であり、信号処理や音響・振動解析、暗号、などさまざまな場面で使われている数理アルゴリズムである。

### \*4 密度汎関数法

密度汎関数理論に基づいて系のエネルギーや種々の物性を計算する手法全般。密度汎関数理論は、電子密度の情報から系のエネルギーや物性を計算できることを示した Hohenberg-Kohn の定理によって理論的基盤を得た。また、物質の特性・機能を原子や電子のレベルまで掘り下げて理解することができる。（[MateriApps](#) のキーワード解説から一部引用）

### \*5 実空間グリッド

密度汎関数法計算を実行する際に用いられる方法の一つ。実空間をメッシュで切り、各点での電子状態の記述を行う方法。高効率大規模並列計算の実装に向いていることや、境界条件の自由度の高さが特色である。実際の電子状態計算では、電子状態が従う方程式が差分方程式として表現され、これを適当な補間法（有限要素法やスプライン補間法など）のもとで解くことになる。（[MateriApps](#) のキーワード解説から一部引用）

### \*6 AWS のハイパフォーマンスコンピューティング

ハイパフォーマンスなファイルシステム、高スループットなネットワークがクラウドで提供されたシステム。大規模で複雑なシミュレーションをクラウド環境で実行することを可能にしています。

### \*7 量子虚時間発展法

量子コンピュータの性能を最大限に引き出すべく、世界中で開発が進められているアルゴリズムの1つ。Quemix はその初期から本アルゴリズムに注目し、量子虚時間発展法の研究開発に大きく寄与している。その適用範囲は、材料計算（量子化学計算）のみならず、最適化問題など幅広く活用が可能で、大きく注目されている。