jh230001

FMO プログラム ABINIT-MP の高速化と超大規模系への対応

望月祐志（立教大学）

概要

本課題は、jh210036-NAH/jh220010 と継続しており、ABINIT-MP プログラムの改良を主として研究開発活動を行っています。プラットフォームとしては、これまでの富士通の A64FX スパコンと共に、NEC のベクトル型スパコン SX-Aurora TSUBASA も対象とした他、GPU 対応スパコン向けの作業も立ち上げました。大きな成果としては、ABINIT-MP Open Ver. 2 Rev. 8 を 2023 年 8 月にリリースし、「富岳」と「不老」Type I サブシステムに年度内に納品・ライブラリ登録したことを挙げます。A64FX 上では標準的な FMO-MP2 ジョブは、2020 年版の Ver. 1 Rev. 22 に比して 1.5～2 倍超の高速化を達成しました。また、タンパク質の液滴モデルの計算で、ジョブ未完走の要因となっていた対イオン周りの扱いを改良しました。GPU 対応では、2 電子積分生成で数十倍の加速を確認できました。「不老」 Type II サブシステム関係の成果としては、タンパク質の構造推定システムである AlphaFold2 のライブラリ版の更新、量子シミュレータ cuQuantum を使ったユニタリー結合クラスター計算と FMO スキームとの接続などがあります。

1. 共同研究に関する情報

⑴ 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東北大学 サイバーサイエンスセンター

名古屋大学 情報基盤センター

九州大学 情報基盤研究開発センター

⑵ 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野(HPCI 資源利用課題のみ)

超大規模数値計算系応用分野

(4) 参加研究者の役割分担

望月が全体の進捗を管理すると共に、ABINIT-MP のテスト、関連ドキュメントの作成とリリース、ならびに学会発表などの情報発信も手掛けています。また、FMO と量子計算の接続にも寄与しています。中野氏（2023 年度まで国立医薬品食品衛生研究所）と坂倉氏（計算科学振興財団）は、望月と連携して ABINIT-MP の Open シリーズ Ver. 2 系の改良を進めています。土居氏と奥脇氏は、ABINIT-MP の実行を補助するスクリプト群を整備しています。森脇氏（2023 年度まで東京大学）は、AlphaFold2（以下 AF2 / Jumper et al., Nature 596 (2021) 583-589）の「不老」 Type II サブシステムでのライブラリ更新を大島氏（九州大学）と共に実施しています。泰岡氏、平野氏、山本氏、森氏（慶應義塾大学）は、生体分子のシミュレーションのアドバイスを与えています。杉﨑氏（慶應義塾大学）は量子コンピュータを使う量子化学計算の専門家として貢献しています。片桐氏（名古屋大学）と大島氏（九州大学）は HPC の立場から、富士通 A64FX に限らず GPU 化などについても様々なアドバイスとコーディネートを行って

います。片桐研の大学院生（満田氏と森下氏）は教員の指導を受けて活動しています。滝沢氏（東北大学）も HPC のエキスパートであり、加藤氏（NEC）による NEC SX-Aurora TSUBASA（以下 SX-AT）機である AOBA-A/S での性能評価なライブラリ整備を支援しています。

2. 研究の目的と意義

本課題は、jh210036-NAH/jh220010 課題からの継続であり、申請時に挙げた項目の順に、①ABINIT-MP プログラムの高速化を主とする改良、②タンパク質構造推定アプリケーション AF2 の整備、③cuQuantum を利用する量子シミュレーションの推進、の 3 つから構成されています。

①については、A64FX 向けの高速化と種々の機能追加をまとめた Open シリーズの Ver. 2 Rev. 8 を 2023 年 8 月 25 日にリリースし、HPCI 拠点でのライブラリ登録を図りつつあります。②についても、「不老」 Type II サブシステム上の AF2 を更新して登録・公開しています。③は、現在の量子コンピュータの実機（NISQ）の状況が依然として厳しいため、NVIDIA の量子計算シミュレータ cuQuantum（https://bit.ly/3PVaot9）を「不老」 Type II の GPU を活かして使い、HPC 文脈でアルゴリズム開発と検証を進めるものです。

まとめますと、①と②はライブラリ提供としての公益性も目的として意識した研究開発活動なのに対し、③は将来の量子コンピュータ（FTQC）の活用への布石づくりという実験的な側面を帯びた基礎研究になります。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

①に関しては、片桐氏が運営管理を担う名古屋大学の「不老」 Type I は「富岳」と同じ A64FX スパコンで、混雑が相対的に少ないために TAT 的に有利で ABINIT-MP の改良作業と性能評価を進める環境としては好適です。また、滝沢氏が管轄する東北大学の「AOBA」 A/S サブシステムではベクトル化対応版の ABINIT-MP の性能評価が行えます。

前年度の jh220010 課題から手掛けている②の AF2、③の量子シミュレータ cuQuantum のプラットフォームはいずれも「不老」 Type II で、大島氏が利用環境の構築を担っています。

以上のように、名古屋大学と東北大学のスパコンを作業拠点とし、HPC の専門家と量子化学・計算化学の専門家とが学際的コラボレーションを図って研究開発を進めているのが本課題の特徴です。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

①の ABINIT-MP の改良については、2021 年度の jh210036-NAH で 2 電子積分生成ルーチンの SIMD 化、可視化専用配列の削除などの第一段階作業を反映させた Ver. 2 系の最初の版 Rev. 4 を 2021 年 9 月 16 日にリリースしました。実作業では、中野氏と坂倉氏の貢献が大きいです。改良前の 2020 年度の Ver. 1 Rev. 22 に比べ、利用者の多い FMO-MP2 ジョブは A64FX スパコン上で 1.2～1.4 倍の高速化となりました。大規模系対応では、古典分子動力学（MD）シミュレーションの軌跡からシェーピングされた、フラグメント総数で 1.1 万のタンパク質の液滴モデルの扱いが可能となりました（望月ら, J. Comp. Chem. Jpn. 20 (2021) 132-136)。

ABINIT-MP の Ver. 2 Rev. 4 のリリース後も引き続き作業を続け、レジスタスピル低減のための 2 電子積分ルーチンでのループ分割、Fock 行列の構築部からの if 分岐除去、ならびに積分バッファリングなどを行い、jh220010 の終了時点で作業版の Ver. 2 Rev. 6 をまとめました（望月ら, J. Comp. Chem. Jpn. 21 (2022) 106-110)。その後、相互作用エネルギー解析の強化、ならびに励起エネルギーとイオン化エネルギー算定の追加を

行って各種テストを重ね、後で述べる Ver. 2 Rev. 8 としました。Ver. 2 Rev. 6 の FMO-MP2 ジョブの加速は Ver. 1 Rev. 22 比で 1.5～2 倍超でした。液滴モデルに対してはタンパク質遠方の水をクラスタリングするスクリプトを土居氏が開発し、元のフラグメント総数 1.8 万のスパイクタンパク質の系を実効数で 1 万フラグメントにまで低減し、ノード数の多い「富岳」上では容易に FMO-MP2 計算が行えるようにできました。

②については、AF2 の専門家である森脇氏が大島氏と連携して 2022 年度の jh220010 課題から「不老」 Type II 上で整備・更新を続けて実施しました。

③の「不老」 Type II 上の cuQuantum シミュレータを使った量子化学計算も杉﨑氏中心に jh220010 から始まりました。2022 年度は、B 原子～Lr^{98+}イオンまでの $2p_{1/2}$－$2p_{3/2}$ のスピン軌道分裂エネルギーを、相対論効果を高度に考慮した上で、ベイズ推定を援用してエネルギー差を直接算定する位相差アルゴリズムによって系統的かつ定量的に評価することに成功しました。その際に 43 倍もの GPU 加速を得ました。論文は arXiv にて 2022 年度内に公開し、2023 年に入ってオープンアクセスで正式出版されました（7-(1)-[1]）。

5. 今年度の研究成果の詳細

①では、ABINIT-MP の Ver. 2 Rev. 8 が第一の成果物となります（7-(1)-[2], 7-(5)-[2]）。長年ベンチマークに用いている系の 1 つである HIV プロテアーゼとリガンドの複合体を使い、「不老」 Type I サブシステム上で、OpenMP/MPI の混成並列で実行した FMO-MP2/cc-pVDZ ジョブのタイミングを表 1 にまとめました(24 スレッド/204 プロセス)。改良前の Ver. 1 Rev. 22、積分ルーチン群の SIMD 化などの一次改良を行った Ver 2 Rev. 4、さらに追加改良した Ver. 2 Rev. 8 を比較すると、HF/SCF ステップが速くなっており、

表 1. HIV プロテアーゼの FMO-MP2/cc-pVDZ ジョブのタイミング（「不老」 Type I 上）.

Timing in second	V1 R22	V2 R4	V2 R8
Monomer SCF	864.9	617.8	387.4
Monomer MP2	21.6	20.1	18.3
Monomer (Total)	890.9	642.2	410.0
Dimer ES	198.0	204.5	178.6
Dimer SCF	421.8	344.0	260.8
Dimer MP2	354.1	344.2	344.4
Dimer (Total)	1205.6	1091.7	909.8
FMO (Total)	2096.5	1733.9	1319.8
Total time	2101.4	1737.2	1323.2
Acceleration	1.0	1.2	1.6

Before

```
134:          allocate(xxxx_work(ngklmax,6,ncsp))
137:          klrs=0
138: +------>    do kl=1,ncsp
139: |V----->      do nrs=1,ngkl(kl)
140: ||            xxxx_work(nrs,1,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,1,1)
141: ||            xxxx_work(nrs,2,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,2,1)
142: ||            xxxx_work(nrs,3,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,3,1)
143: ||            xxxx_work(nrs,4,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,4,1)
144: ||            xxxx_work(nrs,5,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,5,1)
145: ||            xxxx_work(nrs,6,kl) = xxxx(klrs+nrs,1,1,6,1)
146: |V-----      end do
147: |          klrs=klrs+ngkl(kl)
148: +------    end do
```

After

```
139:          allocate(xxxx_work(ncsp,ngklmax,6))
153: +------>    do nrs=1,ngklmax
154: |V----->      do kl=1,ncsp
155: ||            if(nrs .le. ngkl(kl)) then
156: ||            klrs = klrs_work(kl)
157: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,1) = xxxx(klrs+nrs,1,1,1,1)
158: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,2) = xxxx(klrs+nrs,1,1,2,1)
159: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,3) = xxxx(klrs+nrs,1,1,3,1)
160: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,4) = xxxx(klrs+nrs,1,1,4,1)
161: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,5) = xxxx(klrs+nrs,1,1,5,1)
162: ||     G      xxxx_work(kl,nrs,6) = xxxx(klrs+nrs,1,1,6,1)
163: ||            endif
164: |V-----      end do
165: +------    end do
```

図 1. 積分ルーチンのベクトル長の延伸例.

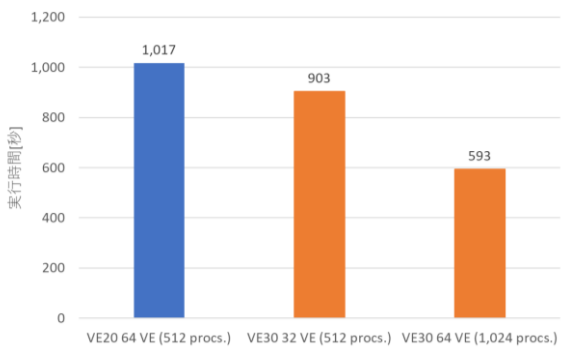

図 2. 新型コロナウイルスのメインプロテアーゼの FMO-MP2/6-31G*のタイミング（「AOBA」上 / VE20=A サブシステム, VE30=S サブシステム）.

FMO 固有の静電ポテンシャル（ESP）場を反復的に最適化する自己無撞着電荷(SCC)のモノマー段階での加速が Ver. 2 Rev. 8 ではとりわけ顕著です。Dimer-ES と MP2 でも積分生成の改良の効果が見えます。トータルでの加速は、Ver. 1 Rev. 22 比で 1.6 倍で、Ver. 2 Rev. 4 よりも高速化されています。なお、このベンチマークテストでは指定していませんが、モノマーSCC のアンダーソン加速で密度行列をベースにするオプションを追加しており、系によっては通常の Fock 行列ベースより反復回数が減って実行時間がさらに短縮される場合もあります。

機能の追加として Ver. 2 Rev. 8 では、フラグメント間の相互作用エネルギー（IFIE）を 4 つの成分（静電項：ES、交換反発項：EX、電荷移動項：CT、分散相互作用項：DI）に分割する PIEDA の強化を行っています（Matsuoka et al., J. Comp. Chem. 45 (2024) 898-902）。1 点目は、MP2 の電子相関エネルギーを DI に割り当てているのを、多重極展開に基づく局所応答分散(LRD)によって分散力安定化のみを ES(LRD)として評価し、残りの安定化を過剰イオン性の低減などの相関補正とするものです。2 点目は、過大評価がしばしば問題となる ES 項に対する拘束付き ESP 再現点電荷（RESP）で古典的な静電相互作用エネルギーES(RESP)を参考値として算出するものです。これにより、利用者にとって相互作用解析の利便性が高まりました。その他の機能追加には、対象系全体を FMO-HF で解いた後、注目領域のみをより高い近似で扱う MFMO 機能で、電子相関補正を含めた励起エネルギーとイオン化エネルギーの算定も可能としたことが挙げられます（Ver. 2 Rev. 4 では基底状態での相関エネルギー補正までの対応）。

Ver. 2 Rev. 8 のスパコンセンターでのライブラリ登録は、2024 年 4 月時点で「富岳」、「不老」、それに京都大学の「Camphor3」が済

表 2. 2 電子積分のタイプ分け.

Type	Unique quartet	Extra
[s4]	(ss|ss)	
[s3p1]	(ss|sp)	
[s3d1]	(ss|sd)	
[s2p2]	(ss|pp), (sp|sp)	
[s2p1d1]	(ss|pd), (sp|sd)	(ss|dp)
[s2d2]	(ss|dd), (sd|sd)	
[s1p3]	(sp|pp)	
[s1p2d1]	(sp|pd), (sd|pp)	(sp|dp)
[s1p1d2]	(sp|dd), (sd|pd)	(sd|dp)
[s1d3]	(sd|dd)	
[p4]	(pp|pp)	
[p3d1]	(pp|pd)	(pp|dp)
[p2d2]	(pp|dd), (pd|pd)	(pd|dp)
[p1d3]	(pd|dd)	
[d4]	(dd|dd)	
Count	21	5

```
do scc-grand-iteration
  do monomer-loop <MPI>
    do scf-iteration
      do one-int-loop
      do eri-loop with GPU (from (ss|ss) to (dd|pp))
      do eri-loop (dd|dp) & (dd|dd)
    enddo
  enddo
enddo (scc)
<mp2 processing> for each monomer

do dimer-loop <MPI>
  do scf-iteration
      do one-int-loop
      do eri-loop with GPU (from (ss|ss) to (dd|pp))
      do eri-loop (dd|dp) & (dd|dd)
  enddo
  <mp2 processing> for each dimer
enddo
```

図 3. FMO-MP2 計算の GPU 対応時のループ構造の基本スケッチ.

んでいます。

Ver. 2 Rev. 8 のリリース後に取り組んだのは、タンパク質の液滴モデルでの対イオンの点電荷扱いによる近似です。前出のスクリプトにより、素で 2 万個のフラグメント数のタンパク質の液滴モデルが扱えるようになり、新型コロナウイルスのスパイクタンパク質のモデルも計算対象とできました。しかし、受容体結合ドメイン(RBD)が開いた構造では、MD 軌跡由来で残した対イオン(Na(I)や Cl(I)など)周りのダイマーHF 計算で未収束が多発して、ジョブの完走率が著しく劣化する事態となりました。これは、古典 MD では交換反発が考慮されずにイオンと周辺原子との距離が近づきすぎるためです。そこで、イオンを古典的な点電荷として近似できるように液滴構造モデルのデータファイルのスクリプト処理、それに ABINIT-MP 本体の 1 電子積分計算の改造によって導入しました。これにより、完走率はほぼ 100%となって問題が解決されました(詳しくは「富岳」の hp220352 課題の報告書に記載)。この機能は、Ver. 2 の次の版(Rev. 12)でリリースの予定です。

次に、坂倉氏と加藤氏が主導して進んだ SX-AT 向けのチューニングについて述べますが、ここでも対象は 2 電子積分の生成周りとなっています。改良の 1 つは、基底関数の{s, p, d}軌道タイプの 3^4=81 種の並びでラベルされたベクトル化積分ルーチン群の中の sub_dddd_vec から sub_ssds_vec までの 25 種に対して図 1 のようにループ順を入れ替えました。この改良によって、各ルーチンで 1.4 倍～2 倍の高速化が得られました。この他にも地道な作業を重ねて、ループ長さの延伸を行いました。例えば、sub_ddps_vec では平均ベクトル長が 69.9 から 227.1 と延び、実効性能が 6.5 GFLOPS/core から 19.1 GFLOPS/core に改善されました(NEC 社内の VB20 機で測定)。

SX-AT 対応のチューニングを行った Ver. 2

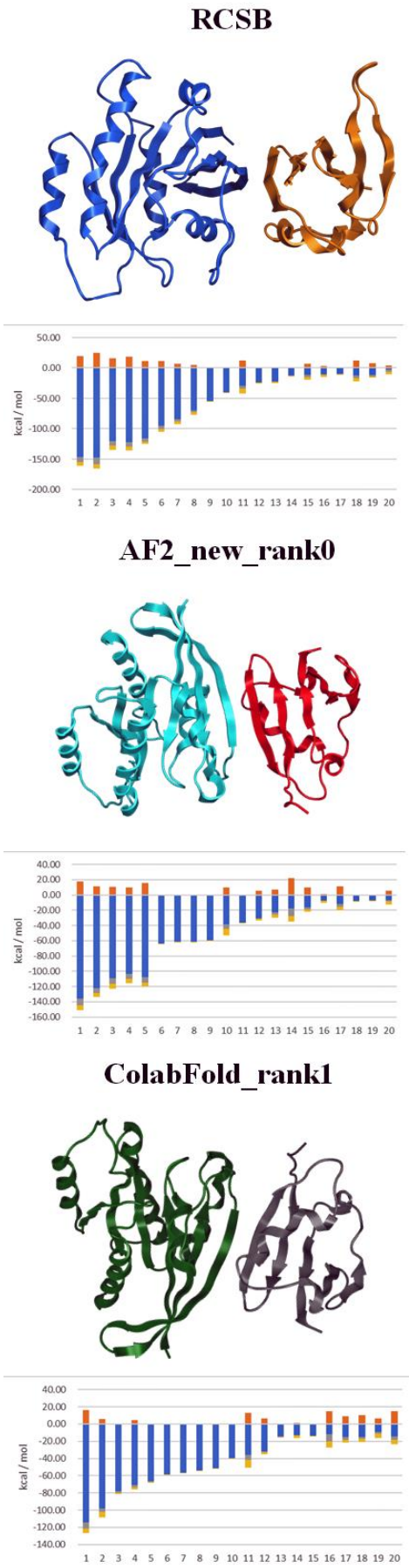

図 4. 3KUD モデルの構造と PIEDA 値(上位 20 個 / 青=ES, 橙=EX, 灰=CT, 黄=DI).

Rev. 4 は 2023 年 9 月に「AOBA」の A（VE20 機）と S（VE30 機）のサブシステムにライブラリ導入しました。図 2 は、HIV プロテアーゼと同様にベンチマークに用いている新型コロナウイルスのメインプロテアーゼとリガンドの複合体（Hatada et al., J. Chem. Inform. Model. 60 (2020) 3593-3602）の FMO-MP2/6-31G*ジョブのタイミング比較です（フラット MPI で、4 プロセス/フラグメントの設定）。VE30 ではコア数が 2 倍になったのと、L3 キャッシュが新設されているのが VE20 からの顕著な改良点です。プロセス数を 512 で揃えると L3 の効果で 1.1 倍、また同じ VE 数とすると 1.7 倍の高速化となりました。見方を変えますと、VE30 では半分の VE 数で VE20 と同等以上の処理速度が得られるので、ジョブ投入の際にはメリットがありそうです（実行待ち時間の低減を期待）。

①の最後として、GPU 対応について坂倉氏による進捗がありましたので触れます。これは、2022 年度の下期の東京大学情報基盤センターの「GPU 移行促進プログラム」の支援にて、HF 計算部分を切り出したミニアプリの GPU 化を NVIDIA の成瀬彰氏にしていただいたことに端を発します（7-(1)-[2]に記載）。2023 年度になり、この改造ミニアプリを参考に、ABINIT-MP 本体の 2 電子積分を軌道のユニークな組み合わせ 21 種（表 2 参照）に再構成する作業を進めました。d 関数を含まない 6-31G 基底での評価では、GPU による積分計算の加速は 30～70 倍に達しています（タイプに依存）。FMO 化は 2024 年度からですが、全体の計算フローは図 3 のようになると考えています。メモリ要求と演算量の観点から、d 関数を 3 つないし 4 つ含む積分は CPU で処理する形となりますが、待たずに並行処理が可能です。

ABINIT-MP の 2024 年度の作業版では、上記の 21 種に再構成された積分ルーチン群での計算となっており、GPU 化しない Xeon 系でのテストでも 1 割程度高速化される現象が見られています（コンパイラ最適化の向上？）。表 2 中で、Extra の 5 つはベクトル化する際には別途考慮しないといけない積分タイプになり、チューニングは 26 種のルーチンが対象となっています。

さて、②の「不老」 Type II 上の AF2 については、2023 年 7 月に v2.3.2 に更新しました（7-(5)-[1]）。また、2024 年 2 月には AF2 の派生システムで森脇氏がコミットしている ColabFold（http://bit.ly/3WlZqk2）のローカル版が利用可能となりました。試行の 1 つとして、jh220010 課題の中でも取り挙げた RCSB/PDB-ID が 3KUD の Ras-GDP と RafRBD のタンパク質複合体の構造推定を行い、FMO-MP2/6-31G*レベルで相互作用解析してみました（望月担当）。図 4 は、タンパク質の界面 4.5Å 内のユニットを跨ぐアミノ酸残基対の IFIE の安定化が大きい上位 20 個を取り出し、PIEDA の形で示したものです（AF2 と ColabFold では「最も確からしい構造」を使っています）。ES 項による安定化が大きく、界面に荷電残基が複数あることがわかります。ただ、ここでは具体的な残基対は記しませんが、RCSB/PDB 構造でのランキングと予測構造でのそれは必ずしも対応していません。しかし、Ras-GDP と RafRB のユニット毎の構造対応は比較的良好です。やはり、タンパク質の界面付近の構造の予測では未だ十分ではないところがあるようです。新型コロナウイルス感染症（COVID-19）のようなパンデミック発生時にアミノ酸残基並びの情報だけからウイルスの標的タンパク質の構造が AF2 で精度よく予測できれば、人造抗体やリガンドの迅速な設計と製造に好適ですので、今後も検証を続けていく予定です（感染症対策）。

杉﨑氏が主担当の③の cuQuantum を用いる量子化学計算では、中間報告で触れた遷移金属化合物の計算を諸事情から一旦ペンディングとし、FMO との接続を優先することにし

ました。FMO 計算では対象系をフラグメントに分割し、そのモノマー群とダイマー群のエネルギーを加成性を前提にして集計します。従って、電子相関理論の基本的な要請である「大きさ無矛盾性（size-consistency)」と「軌道不変性(orbital-invariance)」が共に満たされていることが極めて重要です。そこで、1,2 電子励起ユニタリー結合クラスター（UCCSD）展開を変分的量子固有値（VQE）問題として解き、得られる電子相関エネルギーの精度を確かめることにしました。詳細は、arXiv で初期原稿が公開されている論文（7-(1)-[3]）に記していますので、ここでは以下のダイジェストに留めます。対象とした分子系はフッ化水素分子の 3 量体（$(FH)_3$）と水分子とフッ化水素 2 分子のクラスター（H_2O-$(FH)_2$）で、どちらも水素結合で安定化されています。後者では敢えて、2 つの FH が対称性的に等価となる構造としました。基底関数は最小の STO-3G とし、内殻の 1s は FMO-HF 計算の段階で凍結しました。実際に VQE-UCCSD でエネルギーを求めてみると、指数因子のトロッター分解のエラーで上記の 2 つの基本的要請が壊れえることが判明しました。これは、これまで業界で報告されておらず、「世界初の検証結果」となりました。この悪影響・問題を低減する対処療法は、フラグメントのモノマーとダイマーで正準軌道でなく局在化軌道を使う、あるいはトロッター分解のスライス幅を変えて外挿によるゼロ極限値を得ることです。表 3 に、$(FH)_3$の計算時間を示しますが、GPU 利用のメリットが見えています。ただ、比較のために行った（伝統的な計算による）通常の FMO 結合クラスター展開に比べると数万倍遅いのが実情です。従って、量子計算の「実用性」を追求するというより、将来の FTQC 機の登場を睨んでの基礎的な検証を GPU 加速された量子シミュレータを使って積んでいくというのが現時点でのスタンスになります（量子コンピュータと HPC の学際領域での研究開発)。

表 3. $(FH)_3$の VQE-UCCSD 計算のタイミング（「不老」 Type II 上）.

	CPU (s)	GPU+ (s)	Acc.
Monomer			
"1"	48.3	27.6	1.8
"2"	55.4	28.5	1.9
"3"	49.3	26.5	1.9
Dimer			
"21"	260996.7	34153.3	7.6
"31"	237695.3	34397.3	6.9
"32"	156257.2	21129.0	7.4

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

本課題でのトータルでの研究業績のリストは次項のように、論文や学会での報告、ライブラリ登録などで及第に達していると考えています。また、中間報告後に ABINIT-MP 本体の GPU 対応が進んだのは好材料です。

2024 年度も jh240001 課題として継続をお認めいただいていますが、タイトルは「FMO プログラム ABINIT-MP の次世代化」に変更しました。「次世代化」は、ポスト「富岳」を睨みつつ、GPU への対応と機械学習の導入も含めた「FMO Reborn」を意識して冠したもので、数年間のスパンで活動を考えています。

今後の活動の主軸となるのは、（もちろん）①の ABINIT-MP 関係の改良で、2024 年度は GPU 関係の改良に重みを置きますが、自動チューニング（AT）技術の援用によるコード最適化も考えています。併せて、大規模系対応で必要となる、フラグメント制御や相互作用エネルギーリストといった重要情報の分散保持化に着手し、A64FX スパコン上で実質 2 万フラグメントの計算を可とします。計算機能としても、2023 年度後半から本格的に着手した開殻電子状態の制限付きの扱い（ROHF）の収束性改善と FMO 化などを予定しています

（jh240001 課題の申請後に進展）。Ver. 2 Rev. 8 からの機能追加をどこまで行うかは未確定ですが、可能であればVer. 2 Rev. 12 を 2024 年度下期にリリースできればと思っています。

Ver. 2 Rev. 8 の 2024 年度のライブラリ登録は、北海道大学、東北大学（SX-AT 版）、東京大学、東京工業大学、大阪大学（SX-AT 版）、九州大学を「北から南まで」で完了させます。HPCI 拠点ではありませんが、FOCUS と分子科学研究所でも導入いただく予定です。

機械学習の応用については、2025 年度までの期間で、相互作用エネルギーの予測技術（Doi et al., Jpn. J. Appl. Phys. 62 (2023) 070901-1-6）を転用して、タンパク質の液滴モデルに対するサロゲートモデル化（入力構造からアミノ残基間の相互作用エネルギーを推定）を試みる予定です。また、低コストのFMO計算から高コストな計算の値を見積もる技術についても検討します。

②の AF2 については、アミノ酸残基の側鎖の配向の再現精度について、RCSB/PDB の参照構造との比較調査をFMO相互作用エネルギー評価を含め、小規模なタンパク質から始めて系統的に行います。その際、水を配した MD での構造緩和も併用する形となりそうです。

追記となりますが、2024 年 5 月に AF2 が AF3 に更新されました（Abramson et al., Nature, https://bit.ly/3UThKQ8）。まだ、どのように利用できるかはわからないので、当面は状況を見守っていくことになります。

③の cuQuantum をベースとする量子計算については、FMO/VQE-UUCSD のワークフローを整えることが 2024 年度の目標です。FMO は本質的に並列処理性を持っているので、複数ノードでの実行を睨んでの作業となります。精度を上げるためのトロッター分解でのスライス数を変えた計算も、原理的には同時並行処理が可能なため、将来的な視野に入れています。

7. 研究業績

(1) 学術論文 （査読あり）

[1] "Bayesian phase difference estimation algorithm for direct calculation of fine structure splitting: accelerated simulation of relativistic and quantum many-body effects", K. Sugisaki*, V. S. Prasannaa, S. Ohshima, T. Katagiri, Y. Mochizuki, B. K. Sahoo, B. P. Das, Electr. Struct., 5 (2023) 035006-1-10, （前年度の jh220010 課題での成果の正式出版）.

[2] "FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2023", 望月祐志*, 中野達也, 坂倉耕太, 奥脇弘次, 土居英男, 加藤季広, 滝沢寛之, 成瀬彰, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, J. Comp. Chem. Jpn., 23 (2024) 4-8.

[3] "Size-consistency and orbital-invariance issues revealed by VQE-UCCSD calculations with the FMO scheme", K. Sugisaki*, T. Nakano, Y. Mochizuki, J. Comp. Chem., DOI: 10.1002/jcc.27438 & an early manuscript has been available at arXiv site: <https://bit.ly/3whlHF3>.

(2) 国際会議プロシーディングス （査読あり）

なし.

(3) 国際会議発表（査読なし）

なし.

(4) 国内会議発表（査読なし）

[1] HF 計算に特化した ABINIT-MP ミニアプリの GPU 化の試み"（オンラインポスター）望月祐志*, 坂倉耕太, 成瀬彰, 古家真之介, 下川辺隆史, 芝隼人, 大島聡史, 星野哲也, 片桐孝洋, 理論化学討論会, 横浜, 2023/5/19.

[2] "「富岳」を利用した大規模なフラグメント分子軌道計算について"（口頭：キーノート依頼講演） 望月祐志*, 坂倉耕太, 中野達也, 土居英男, 奥脇弘次, 秋澤和輝, 北原駿, 太刀野雄介, 松岡壮太, 小沢拓, 大島聡史, 片桐孝洋, 第 28 回計算工学講演会, つくば,

2023/5/31.

[3] ″「不老」 Type II 上で cuQuantum 量子シミュレータを用いた相対論的量子化学計算の事例″（口頭）杉﨑研司，Prasannaa V. S.，大島聡史，片桐孝洋，森野慎也，望月祐志*，Sahoo B. K.，Das B. P.，第 28 回計算工学講演会，つくば，2023/6/1.

[4] ″分子軌道計算プログラムの性能評価と自動チューニング適用の検討″（口頭）満田晴紀，星野哲也，望月祐志，坂倉耕太，片桐孝洋，大島聡史，永井亨，河合直聡*，情報処理学会 HPC 部会，SWoPP 2023，函館，2023/8/3.

[5] ″FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2023″（オンライン口頭）望月祐志*，中野達也，坂倉耕太，奥脇弘次，土居英男，加藤季広，滝沢寛之，大島聡史，星野哲也，片桐孝洋，日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会，高松，2023/11/24.

[6] ″フラグメント分子軌道(FMO)計算プログラム ABINIT-MP の現状と今後″（依頼講演）望月祐志*，スーパーコンピューティング・ジャパン 2024 「最先端シミュレーションと AI、これからのスーパーコンピューティング」，2024/3/12.

[7] ″フラグメント分子軌道法と変分量子アルゴリズムに基づく量子化学計算とユニタリー結合クラスター法における Trotter 分解の影響について″（口頭）杉﨑研司*，中野達也，望月祐志，理論化学討論会，つくば，2024/5/21（予定）.

(5) 公開したライブラリなど

[1] 名古屋大学 「不老」 Type II での AlphaFold2 のライブラリ整備に関するニュース告知（2023/7/5 付で v2.3.2 に更新），〈https://bit.ly/3JM6yyB〉，（担当： 森脇由隆，大島聡史）.

[2] ABINIT-MP Open Series Ver. 2 Rev. 8，〈https://bit.ly/3Q6FI8x〉，（2023/8/25 リリース），公開ライブラリ登録状況は 2024 年 4 月時点で｛R-CCS 「富岳」，名古屋大学 「不老」 Type I&II，京都大学 「Camphor3」｝で完了，（R-CCS と名古屋大学の担当： 望月祐志 / 京都大学の担当： 加藤季広，望月祐志）.

[3] 東北大学 「AOBA-A/S」に Ver. 2 Rev. 4 の SX-AT ベクトル処理対応版を 2023/9/6 付けでライブラリ登録，（担当：加藤季広）.

(6) その他（特許，プレスリリース，著書等）

[1] ″フラグメント分子軌道計算による開殻・多参照の量子系の扱い″，望月祐志*，中野達也，坂倉耕太，杉﨑研司，田中成典，計算工学，依頼寄稿，Vol. 29 - 2024 年 9 月号に掲載予定.