jh240001

FMO プログラム ABINIT-MP の次世代化

望月祐志（立教大学）

本課題は、3 年間継続した jh210036-NAH/jh220010/jh230001 からの発展に当たります。ABINIT-MP の高速化のプラットフォームを富士通の A64FX スパコンに限定せず、NEC の SX-AT スパコン、NVIDIA の GPU を搭載する Intel Xeon 系スパコンも含めた幅広い HPCI 資源に対応することを意図しています。GPU 向けの改造では、FMO-HF までの作業が(ほぼ)完了して性能評価し、2 電子積分の生成と Fock 行列の構築で有効な加速を確認しました。大規模系の扱いでは、Python スクリプト群の整備を進め、「富岳」での世界最大規模の FMO-MP2 計算を可能としました。SX-AT では、FMO-MP3 計算を高速化しました。また、開殻系や多配置系の扱いに向けての作業も進めました。関連する活動としては、2024 年度ノーベル化学賞の対象となった AlphaFold のライブラリ整備(「不老」タイプ II サブシステム、「玄界」ノードグループ B)と予測構造の検証も行いました。もう一つ、量子シミュレータ cuQuantum を用いたユニタリー結合クラスター計算と FMO スキームとの接続も試みました。

1. 共同研究に関する情報

(1) 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

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 参加研究者一覧と役割分担

望月が全体の進捗を管理しています。また、HPCI 拠点でのライブラリ整備、R-CCS の「富岳」(hp240030 課題を別途利用) での実証的応用計算の企画、多参照理論の調査検討、論文と学会の発表を手掛けています。中野氏（高度情報科学技術研究機構）はメモリの削減と開殻系対応、坂倉氏（計算科学振興財団）は GPU 対応などで、望月と連携して ABINIT-MP の改良を続けています。土居氏と奥脇氏（立教大学）は、Python のスキルを活かしたスクリプト群を整備しています。森脇氏（東京科学大学）はタンパク質構造予測ツールである AlphaFold2（以下 AF2：J. Jumper et al., *Nature* **596** (2021) 583）と AlphaFold3（AF3：J. Abramson et al., *Nature* **630** (2024) 493）のライブラリ更新を大島氏（九州大学）と連携して「不老」タイプ II サブシステムと「玄界」ノードグループ B で実施しています。泰岡氏、平野氏、山本氏、森氏（慶應義塾大学）は MD シミュレーションの専門家として助言と支援を与えています(hp240030 課題と共通)。杉﨑氏（慶應義塾大学）は、NVIDIA の GPU を活かす量子計算のシミュレータ cuQuantum（https://bit.ly/3PVaot9）を活用する量子化学計算を担っています。片桐氏（名古屋大学）は、HPC の専門家として副代表的な役回りで本課題を推進し、それを大島氏と星野氏（名古屋大学）がサポートする形です。滝沢氏（東北大学）は NEC SX-Aurora TSUBASA（以下 SX-AT）のエキスパートであり、加藤氏（NEC）に

よるベクトル化 ABINIT-MP の東北大学の「AOBA」での性能評価に関わっています。

2. 研究の目的と意義

本課題は、3 年間継続した jh210036-NAH/jh220010/jh230001 の「FMO プログラム ABINIT-MP の高速化と超大規模系への対応」の発展に当たります。差異としては、ABINIT-MP の高速化の対象プラットフォームを「富岳」や「不老」タイプ I などの富士通の A64FX スパコンに限定せず、「AOBA」や大阪大学の「SQUID」等の NEC の SX-AT 系スパコン、あるいは「不老」タイプ II のような NVIDIA の GPU を演算加速器として搭載した Intel Xeon 系スパコンに対しても広げた研究開発活動を主軸の大項目①としています。高速化にあたっては、量子化学・計算化学と情報科学の HPC 分野の学際領域での作業が本質的ですので、本課題のメンバー構成は理に適っています。

課題名の「次世代化」のコンセプト的な背景には「FMO reborn」がありますが、「何らかの演算加速器」が搭載されることが確定している「富岳 NEXT」を意識していることは言うまでもありません。さらに、前課題から継続する数万フラグメントの超大規模なタンパク質の液滴モデルの扱いに加え、これまで FMO 計算では取り組まれてこなかった生体内の遷移金属含有の酵素やラジカルなどの活性部位が開殻・多参照系の問題への対応を意図した機能拡張も新たに含めています。

副軸の一つとして、AI 技術によってアミノ酸残基のシークエンス（FASTA 情報）からタンパク質の立体構造を構築できる AF のライブラリプログラムとしての整備と検証的な応用を②としています（AF は 2024 年ノーベル化学賞の受賞対象）。FMO 計算の主対象はタンパク質ですので、関連性の高い内容です。また、TB 量のストレージを使った配列のデータベース検索の高速処理といった HPC 要素もあります。

もう一つの副軸③は、cuQuantum 量子シミュレータを使う量子化学の基礎的な研究で、FMO スキームとの接続を試みるものです。

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、片桐氏が管理運営を担う名古屋大学の「不老」タイプ I は「富岳」と同じ A64FX スパコンで、混雑が相対的に少なく、ノードのクロック数が一定であるために ABINIT-MP の改良作業と性能評価を進める環境として好適です。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/SX-AT 対応版の ABINIT-MP の性能評価が行えます。

前課題から手掛けている②の AF、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」タイプ II です。AF2/AF3 については、九州大学の大島氏が「玄界」ノードグループ B にもライブラリ整備しています。

以上のように、名古屋大学、東北大学、九州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となっています。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

jh230001 でも活動の主軸は①でしたが、ABINIT-MP の Ver. 2 Rev. 8 を 2023 年 8 月にリリースしたことが先ず挙げられます（Y. Mochizuki et al., *J. Comp. Chem. Jpn.* **23** (2024) 4)。常用される 2 次摂動レベルの FMO-MP2 ジョブの A64FX 上での加速は、jh210036-NAH の成果物として改良した 2021 年 9 月リリースの Ver. 2 Rev. 4 が従前の Ver. 1 Rev. 22（2020 年 6 月版）に比べて 1.2〜1.4 倍なのに対し、Ver. 2 Rev. 8 では 1.5〜2 倍とな

りました。Ver. 2 Rev. 8 では機能面でも強化され、分散力安定化の分離評価（S. Matsuoka et al., *J. Comp. Chem.* 45 (2024) 898)、興味領域での励起エネルギーとイオン化エネルギーの算定が可能となりました。HPCI 拠点での Ver. 2 Rev. 8 のライブラリ登録は「富岳」、「不老」などで行いました。

その他の高速化関係では、SX-AT 向けで Ver. 2 Rev. 4 のベクトル化チューニングを 2 電子積分ルーチンを中心に進め、FMO-MP2 について VE20B と VE30A（演算コア数は 2 倍の 16）との性能評価を行い、後者での L3 キャッシュ追加の効果も確認しました。GPU 化については、2 電子積分の生成ルーチンの再構成と OpenACC 指示詞の導入により、積分タイプに依存しますが、(1 CPU に対して 1 GPU の追加で）30～70 倍の加速を得ました。

②の AF2 関係では、「不老」タイプ II のライブラリを 2023 年 7 月に v2.3.2 に更新しました。生成構造での FMO 相互作用エネルギーによる検証では、Ras-GDP と RafRB の複合体などを扱い、タンパク質複合体の界面のアミノ酸残基の側鎖の向きについては課題があることを示しました。

cuQuantum を使う量子シミュレーションの③では、変分的量子固有値求解（VQE）による 1,2 電子励起ユニタリ結合クラスター展開（UCCSD）と FMO スキームの接続を、$(FH)_3$ と H_2O-$(FH)_2$ の水素結合系で試み、量子化学の基本的要請である「大きさ無矛盾性（size-consistency)」と「軌道不変性（orbital-invariance)」がトロッター分解の影響を受けることを示しました（K. Sugisaki et al., *J. Comp. Chem.* 45 (2024) 2204)。

5. 今年度の研究成果の詳細

①関係の以下の記載内容の多くは、JHPCN の Web サイト（https://bit.ly/3GE9Y89）にある論文[1]がカバーしています。関連の学会発表は[3-7]があります。また、ABINIT-MP

表 1. ABINIT-MP のライブラリ整備状況

HPCI	System name	V1R22	V2R4	V2R8
Hokkaido Univ.	Grand Chariot#	○	○	
Tohoku Univ.	AOBA-A/S*	○	○	○
Univ. Tokyo	Wisteria-O/A	○	○	○
Tokyo Inst. Tech.	TSUBAME4.0	○		○
JAMSTEC	ES4*	○	○	○
IMS	RCCS	○	○	○
Nagoya Univ.	Flow Type-I,II	○	○	○
Kyoto Univ.	Camphor 3	○		○
Osaka Univ.	SQUID*	○	○	○
FOCUS	System A	○	○	○
R-CCS	Fugaku	○	○	○
Kyushu Univ.	Genkai	○		○

*; SX-AT #; Decomissioned

Simple setting

```
#! /bin/bash

#------- pjsub option -------#
#PJM -L rscgrp=a-batch
#PJM -L node=4
#PJM -L elapse=2:40:00
#PJM -j

module load intel/2024.1
module load impi

export OMP_NUM_THREADS=4
export OMP_STACKSIZE=3G
NUM_PROC=104
NUM_PROC2=26

#------- Output file -------#
FILE_NAME=6LU7_moe_new_p3-carbon-smp-des-ccpvdz-v2r8
NUM_CORE=_4n-104p-4t-v2r8-genkai
OUT_NAME=${FILE_NAME}${NUM_CORE}.log

mpiexec -np ${NUM_PROC} -ppn ${NUM_PROC2} ./6LU7-run-smp-ccpvdz.sh > ${OUT_NAME}
```

Detailed setting

```
#! /bin/bash

#------- pjsub option -------#
#PJM -L rscgrp=a-batch
#PJM -L node=4
#PJM -L elapse=2:40:00
#PJM -j

module load intel
module load impi

export I_MPI_DEBUG=5
export I_MPI_PIN_ORDER=spread
export I_MPI_PIN_DOMAIN=omp
export I_MPI_PERHOST=26

export OMP_NUM_THREADS=4
export OMP_STACKSIZE=5G
NUM_PROC=104
#NUM_PROC2=26

#------- Output file -------#
FILE_NAME=6LU7_moe_new_p3-carbon-smp-des-ccpvdz-v2r8-lm6
NUM_CORE=_4n-104p-4t-v2r8-genkai-nanri
OUT_NAME=${FILE_NAME}${NUM_CORE}.log

mpiexec -np ${NUM_PROC} ./6LU7-run-smp-ccpvdz-lm6.sh > ${OUT_NAME}
```

図 1. 「玄界」ノードグループ A での実行 sh 例

表 2. FMO-MP2 ジョブの「玄界」でのタイミング

Basis set	MPI	SMP	SMP/MPI	SMP	SMP/MPI
	4 x 104P	4T x 104P		4T x 104P#	
3-21G	459.2	667.5	1.5	512.0	1.1
6-31G	894.4	1302.4	1.5	988.3	1.1
6-31G*	2570.4	3443.6	1.3	2734.0	1.1
6-31G**	3901.1	5008.3	1.3	4169.2	1.1
cc-pVDZ	6106.3	7613.7	1.2	6170.6	1.0

#; Special setting for NUMA environment

の開発状況は理研の配信講義として公開もしています[13]。

先ず、2024 年度末での ABINIT-MP の HPCI 拠点でのライブラリ整備の状況を表 1 に示します。Ver. 2 Rev. 8 の 2024 年度の登録は、東北大学の「AOBA」A/S（担当：加藤氏）、東京大学の「Wisteria」オデッセイ/アクエリアス（担当：望月）、東京科学大学の「TSUBAME 4.0」（担当：中野氏）、九州大学の「玄界」ノードグループ A（担当：望月）です[9]。RIST の管轄ではありませんが、JAMSTEC の「ES4」（担当：加藤氏）、分子科学研究所の「RCCS」（担当：望月）にも提供しました。なお、北海道大学の「Grand Chariot」は、システム退役（#で表示）のために見送りましたが、2025 年度の jh250002 の活動の中で新システム上でのライブラリ整備作業を行います。

大阪大学の福澤薫先生が運営している FMO の理論創薬への応用のコンソーシアム（FMODD - https://fmodd.jp/）の活動の中で、Ver. 1 Rev. 22 をベースに部分構造最適化（K. Okuwaki et al., *J. Chem. Inf. Model.* 64 (2024) 9449）などが独自に改良されています。その最初のリリース版「FMODD1-2024」を「富岳」の Spack 環境に 2025 年 3 月に福澤先生と連携して提供しました（担当：奥脇氏＆望月）[8]。

ここで、「玄界」ノードグループ A での Ver. 2 Rev. 8 のテストでの SMP 実行の条件設定について述べます。図 1 上は、SMP 実行での通常通りの「シンプルに設定」した sh、同下は大島氏が NUMA 環境を検討された資料（https://bit.ly/4jNFG1x）を元に南里豪志先生（センター教員）にアドバイスいただいて「詳細に設定」した sh です。表 2 は、新型コロナウイルスのメインプロテアーゼと N3 阻害剤の複合体（PDB-ID=6LU7）の FMO-MP2 計算を基底関数を変えながら実行時間を測定した結果です。通常、Intel Xeon 系では SMP の方が flat MPI よりも実行時間は僅かに短

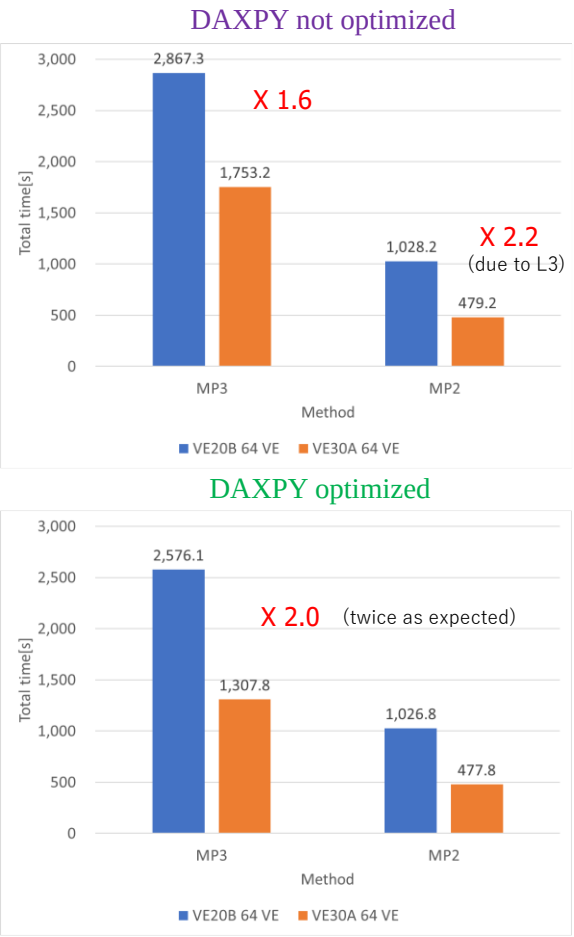

図 2. FMO-MP3 ジョブの SX-AT でのタイミング

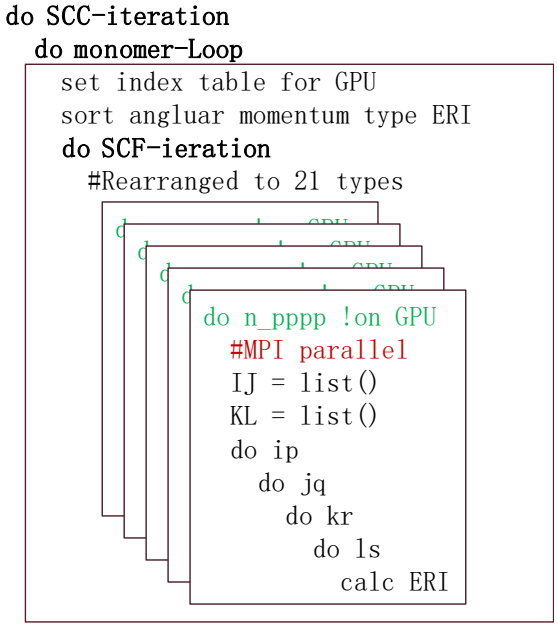

図 3. FMO-HF のモノマー段階の GPU 対応

い（0.97 倍程度）になりますが、「シンプルに設定」した場合には顕著に遅くなります。しかし、「詳細に設定」した場合（#で表示）

はほぼ同等の時間で完了できるようになりました。NUMA での SMP 実行には注意が要ることを実感した事例です。

SX-AT のチューニング（担当：加藤氏）では、3 次摂動の FMO-MP3（Y. Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* **493**（2010）346）の高速化に取り組みました。図 2 に、SX-AT の VE20B と VE30A での FMO-MP2 と FMO-MP3 の実行タイミングを示します（テスト系は前出の 6LU7）。既述のように、VE30A はコア数 16 と VE20B の 2 倍となり、L3 キャッシュが追加されました。図 2 の上段右は MP2 の比較で、加速は 2.2 倍となり、両者の相乗効果が共に見えています。一方、上段左の MP3 では 1.6 倍に留まっています。原因を調べると、MP3 計算の中でもコストの大きい「4 粒子-2 空孔」ダイヤグラムの計算の中で利用する DAXPY に問題があることがわかりました。そこで、DAXPY をインライン展開する等の改良を行って再測定したところ、下段左のように 2.0 倍の加速が得られました。MP3 ではスケーリング補正により、信頼性が高い 1,2 電子励起クラスター展開の 3 電子励起摂動補正（CCSD(T)）の算定値に近い値が得られるメリットがあり、今回の改良は SX-AT での FMO-MP3 計算の実行を促進するものと期待できます。

次に GPU 化（担当：坂倉氏）についてですが、中間報告の段階より作業が進み、FMO-HF は（ほぼ）作業が完了しました[3, 7]。図 3 は、モノマー段階での GPU 処理の模式図です。東京大学の「Wisteria」アクエリアスで ABINIT-MP のライブラリ登録関係で利用できるアカウントで 10 残基の Chignolin の FMO-HF/6-31G ジョブで SMP 実行（7 スレッド、10 プロセス）した場合に対し、2 通り（8 プロセス）で GPU を使った場合とを比べた結果を表 3 に各ステップに分けてまとめます（ベンチマーク測定的な「1 CPU vs 1 CPU + 1 GPU」の条件でないことに留意）。最もコストの大きいのが、2 電子積分を計算して Fock 行列を構築する箇所で、GPU 加速が顕著に見られます。dimer-ES は、まだ GPU 化されていないために、むしろ時間が増えてしまっています（2025 年 5 月に作業完了見込み）。グロスの加速では、GPU 数 4 の場合で 3.6 倍です。残る MP2 計算については、2 電子積分の 4 回の

表 3. FMO-HF ジョブの「Wisteria」での GPU 加速例

Stage of calculation (time in seconds)	10 MPI 7 OpenMP	8 MPI add 1GPU	8 MPI add 4 GPU
set_nshtable	-	2.0	2.5
direct_scf_gmat	91.9	50.5	15.6
dimer_esp_ele	2.8	1.2	0.4
monomer_esp_ele	4.7	3.8	3.9
monomer_esp	1.4	4.6	1.9
dimer_es	2.6	12.8	4.7
dimer_oneint	1.1	7.2	1.9
others	28.9	7.9	5.8
Total	133.3	90.5	36.8

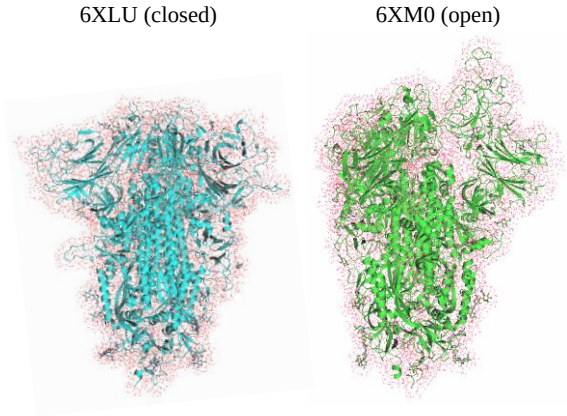

図 4. スパイクタンパク質の液滴モデル 2 種

$$F^{\alpha}_{\mu\nu} = H^{Core}_{\mu\nu} + \Sigma_{\lambda\sigma}\{P^{\alpha+\beta}_{\lambda\sigma}(\mu\nu|\sigma\lambda) - P^{\alpha}_{\lambda\sigma}(\mu\lambda|\sigma\nu)\}$$

$$F^{\beta}_{\mu\nu} = H^{Core}_{\mu\nu} + \Sigma_{\lambda\sigma}\{P^{\alpha+\beta}_{\lambda\sigma}(\mu\nu|\sigma\lambda) - P^{\beta}_{\lambda\sigma}(\mu\lambda|\sigma\nu)\}$$

	closed	open	virtual
closed	$A_{cc}F^{\alpha}+B_{cc}F^{\beta}$	F^{β}	$(F^{\alpha}+F^{\beta})/2$
open	F^{β}	$A_{oo}F^{\alpha}+B_{oo}F^{\beta}$	F^{α}
virtual	$(F^{\alpha}+F^{\beta})/2$	F^{α}	$A_{vv}F^{\alpha}+B_{vv}F^{\beta}$

図 5. ROHF の Fock 行列の α / β 成分の混合

表 4. CASCI エンジンの並列化加速の例

$^3B_1$	#Node	1	2	4	8	16
	Time (s)	470.4	239.3	128.6	70.4	43.2
	Acc.	1.0	2.0	3.7	6.7	10.9
$^1A_1$	#Node	1	2	4	8	16
	Time (s)	433.6	225.4	116.7	63.9	39.1
	Acc.	1.0	1.9	3.7	6.8	11.1

線形変換で DGEMM で処理できるため、GPU 化は直截と想定しており、2025 年度上期で達成する予定です。

大規模系への対応（担当：土居氏＆中野氏＆坂倉氏＆望月）としては、MD シミュレーション（担当：平野氏＆山本氏）由来の新型コロナウイルスのスパイクタンパク質の液滴モデルの FMO-MP2/6-31G*ジョブを「富岳」の 8 ラック使用では、1 つの構造を僅か 2 時間で処理できるようになったことが挙げられます（hp240030 課題と連動）[2]。図 4 に、レセプター結合ドメイン（RBD）のクローズ型とオープン型の 2 種の構造（PDB-ID を明示）を示します。残基の総数は 3.3 千で糖鎖を表面に持ち、水分子とイオンを含めたフラグメント総数は 2 万に達し、液滴構造サンプルの総数は 2 百あります。この多サンプルの FMO-MP2 計算は、2025 年春時点で世界最大規模の事例となっていますが、Python スクリプト群の整備と JHPCN の活動を通じての ABINIT-MP の改良が実を結んだ成果と言えます。なお、サンプル数は少ないですが 6-31G*より軌道数の多い cc-pVDZ 基底での完走も確認しています。

大規模系対応をさらに進めるため、フラグメント数の自乗依存性を持つ情報配列を線形になるようにメモリ圧縮する作業も行っています（担当：中野氏）。水分子のクラスターですが、4 万フラグメントが視界に入りました。

ここまで記してきた主軸の①に関連するその他の活動についても以下に 3 件触れます。先ず、開殻系の扱い（担当：中野氏）では、非制限 HF(UHF)で軌道を決め、非制限 MP2(UMP2)で電子相関を導入する機能が ABINIT-MP に実装されていましたが、スピン汚染の問題から実用計算に供すことはできませんでした。そこで、制限付きの ROHF を UHF ルーチン群を利用しつつ実装する作業を進めてきています[15]。図 5 に、α スピンと β スピンの UHF-Fock 行列からの ROHF-Fock 行列の構成を示します。ROHF の収束では、一旦開殻部分を除いた正荷電の閉殻部分を HF で収束させた後、開殻をアドオンする 2 段階法で実装しており、収束性の改善を図っています。FMO の扱いでは、通常の 2 体と 3 体補正（FMO3）、ならびに興味領域に多層近似で適用（MFMO）する作業を 2025 年度に実施します。ROHF に対する電子相関の補正は、UMP2 モジュールを共用できる RMP2 を考えており、2025 年度下期には仕掛りとする予定です（担当：望月）。

2 件目は、P450 などの鉄イオンを中心に持つ系を扱うための多参照の計算で、軌道の最適化は完全活性空間型の CASSCF が第一選択肢になります[15]。カーネルの完全活性空間の配置間相互作用（CASCI）計算のプログラムは、2007 年に開発していた（K. Tanaka et al., *Theor. Chem. Acc.* **117** (2007) 397）のですが、新しい Xeon の環境に合うように調整し、MPI 並列の性能を再評価してみました（担当：坂倉氏＆望月）。表 4 に、メチレン分子（CH_2）の 3 重項と 1 重項の DZP 基底での計算時間と加速を示しますが、ここで変数の総数は各々 2.5 百万と 1.5 百万です。並列化スケーリング性は及第で、プログラム的には 1 億までは容易に扱えますので、変数が増えればより良好な加速になると思われます。CASCI モジュールからは、1,2 電子の密度行列が得られ、それらを元に分子積分との縮約から軌道最適化の計算を行います（担当：望月）。このプロトタイピングは、2025 年下期に実施予定です。CASSCF 後の電子相関の導入は、「大きさ無矛盾性」と反復計算が不要なことから NEVPT2（C. Angeli et al., *J. Chem. Phys.* **117** (2002) 9138）を候補として作業式を整理しています。

3 件目は、FMO 相互作用エネルギーのサロゲートモデリング（担当：土居氏）で、多構造サンプルでの計算の総コストの抑制を意図してのものです（論文投稿中）。具体的には、FMO-MP2/6-31G*での値を、より安価な基底関数である 3-21G での値に対し、電荷情報や距離情報からなる記述子を使って補正して予測する

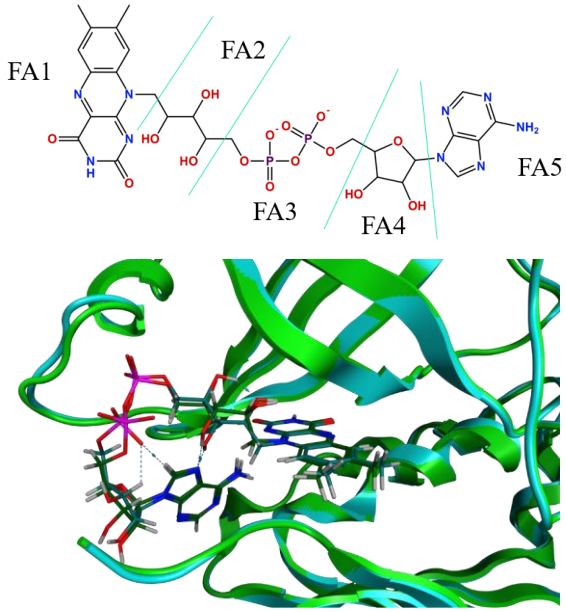

図 6. FAD の分割（上）と 1A8P での結合領域（下）

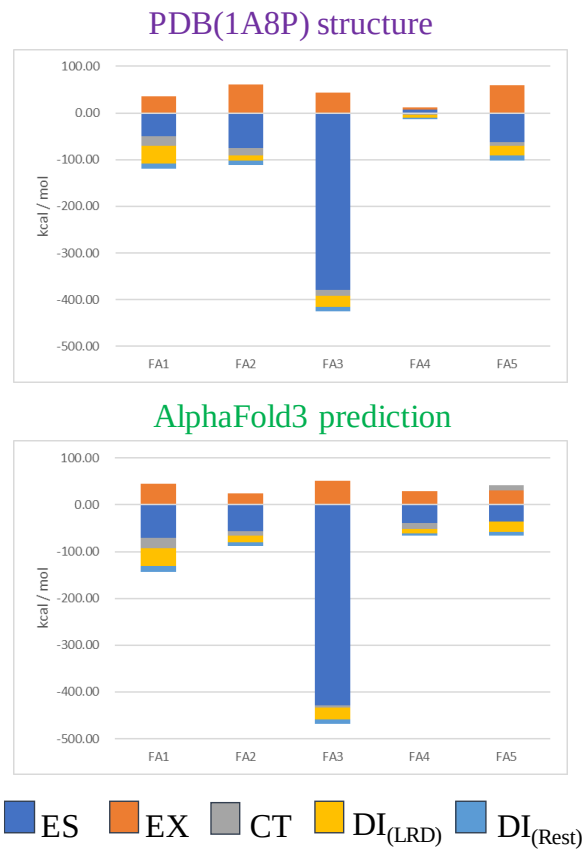

図 7. 1A8P の PDB と AF3 構造での相互作用エネルギー

試みです。Chignolin の液滴モデルを使ったテストでは、実用精度があることが確認できており、コストは 1/2.7 に低減できています。3-21G 基底が sp 関数のみであることは、今後

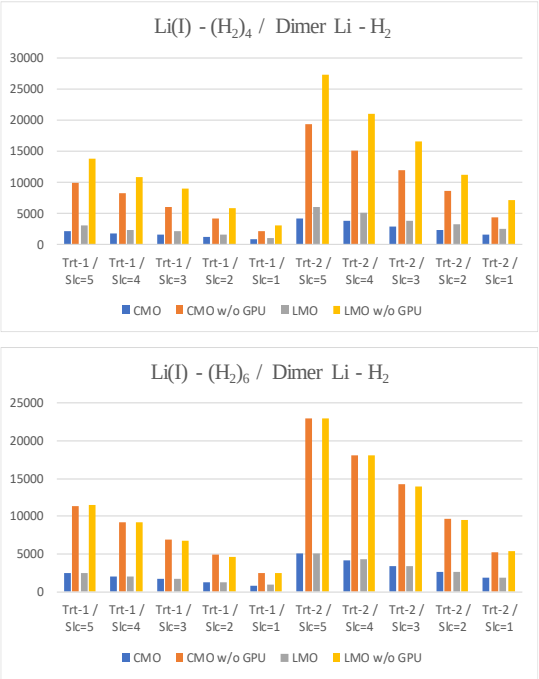

図 8. FMO/VQE-UCCSD の「不老」でのタイミング

の GPU 利用の視点からも有望と思われます。

さて、②についてです（担当：大島氏＆森脇氏）。これまでの「不老」タイプ II に加え、「玄界」のノードグループ B でも AF2 が提供されました[10]。また、AF の解説記事の公開（担当：森脇氏）もあります[11, 14]。AF3 は AF2 と異なり、利用者が個別に DeepMind 社に登録する必要がありますが、「不老」と「玄界」でのインスタレーションはなされています（担当：大島氏＆森脇氏）。予測構造の検証も継続して行いましたが、ここでは AF3 の Web サイトにあった PDB-ID=1A8P のフェレドキシン-NADP+レダクターゼに補因子のフラビンアデニンジヌクレオチド(FAD)が結合した系(図 6)についての結果を紹介します(担当:望月)。FAD は大きいので、Python スクリプトで 5 つに切断（担当：土居氏）していますが、図 7 は各断片から見た相互作用エネルギー和の成分分解（PIEDA）をプロットしたものです。PDB の結晶構造と AF3 の予測構造の対応は妥当な一致を示しています。FA3 はリン酸部分が荷電しているために、大きな値となっています。AF2/AF3 とは別に、DeepMind 社では、タンパ

ク質のデザインツールとして AlphaProteo（https://bit.ly/3GD1NJg）を開発しています。例えば、新規感染症の発生時に人造の中和抗体を開発する用途も考えられますので、こちらも 2025 年度に調査するつもりです。

最後に、③の量子シミュレーションに関してです（担当：土居氏＆杉﨑氏＆望月）。VQE-UCCSD 計算を FMO の同時並行実行性を活かし、基底関数を STO-3G として Li^+イオンに配位した水素（H_2）分子のクラスター（個数は 4 と 6）に適用しました（論文投稿中）[12]。「不老」タイプ II 上でのタイミングデータを図 8 にプロットしています。トロッター分解の次数は 1 と 2 で、エネルギー外挿のためにスライス幅を変え、正準軌道と局在化軌道の 2 通りで GPU 利用の有無をまとめています。トロッター次数が 2 となると演算量が倍化するので、応じた計算時間の増加が見られます。また、局在化軌道の方がやや時間がかかります。GPU 加速は 4 倍程となります。しかし、中間報告書でも書いていますが、通常の FMO-CCSD/STO-3G の全処理が 0.1 秒で終わることから、10 万倍のオーダーのコスト増加は「実用性の観点からは厳しい」という結論に達しました。実のところ、2025 年度の jh250002 では、この VQE-UCCSD の量子シミュレーションの項目は外しています。ただ、量子アニーリングシミュレーション（QUBO/HOBO）の応用としてタンパク質の格子モデルでの畳み込みについて 2024 年度に別途試みており、今後、JHPCN の活動文脈に加える可能性はあります。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2024 年度の jh240001 の活動は、FMO-HF の中の dimer-ES の GPU 化が年度内に終わらなかったこと以外、クリアできたと考えています。また、計画外でしたが、相互作用エネルギー算定のサロゲートモデルに端緒を付けることができたのはよかったと思います。

ABINIT-MP の Ver. 2 Rev. 8 のリリース後に行った諸改良、機能追加を反映させた Ver. Rev. 12 は 2025 年度内のリリースを予定しています。FMO-MP2 までの GPU 対応、また開殻・多参照系の計算機能は Ver. 3 系に含めることにしています。これが、ABINIT-MP の「次世代化」の基本路線です。

2024 年度下期から、東京大学と筑波大学が共同運営する JCAHPC の「Miyabi-G」を東京大学のご厚意でテスト利用し、2025 年度からは jh250002 の中で正式に使い始めています。現時点で十分な検討はできていませんが、GH200 での CPU コア数と GPU コア数のバランスには注意が要ることがわかってきています（MiG/MPS を試行）。2030 年度に稼働が見込まれる「富岳 NEXT」に関しては、1 つのノードの構成が「CPU が 2 基、演算加速器が 4 基」とされています。実体はまだ詳らかになっていませんが、最適実行条件の設定難度は「Miyabi-G」よりも増すことが予想され、AI ツールの利用が必要となるかもしれません。

周辺状況としては、アイオワ州立大学の Mark Gordon 氏がリーダーの米豪共同グループでは、マルチ GPU 環境での実行を念頭に EXESS なる FMO 専用プログラム（J. L. G. Vallejo et al., *J. Chem. Phys.* **159** (2023) 044112）を GAMESS-US とは別に開発しており、試金石として SC21 のゴードンベル賞のファイナリスト論文（https://bit.ly/431vo6Y）を既に出しています。2 電子積分は、恒等分解（RI）による近似で 3 階テンソルで扱うため、HF と MP2 はカーネル処理が DGEMM 化され、GPU 加速がきわめて有効に効きます。こうしたことから、「富岳 NEXT」での使用を念頭に、RI ベースの「新しい FMO プログラム（FMO-X）」を開発することにしました。位置づけとしては、「次世代化」の発展路線となります。jh250002 の活動では、RI 積分の生成アルゴリズムの調査検討を始めていますが、片桐氏が jh250015 で手掛けているコード生成 AI の利用も視野に入れています。