

jh250002

## FMO プログラム ABINIT-MP の次世代化

望月祐志（立教大学）

jh240001 からの継続の 2 年目ですが、多様な進展がありました。まず、大規模な液滴モデルの扱いを容易にする ABINIT-MP の新しい版として Open Series Ver. 2 Rev. 12 をまとめました。また、GPU 対応に関しては MP2 エネルギー計算までの作業がほぼ完了しましたので、Ver. 2 Rev. 16 としてリリース予定としました。さらに、2 電子積分を恒等分解 (RI) 近似で扱うことにより、GPU 向けの行列積指向の処理を行える新しいプログラム FMO-X のプロトタイプを確保できました。Ver. 3 系でリリースを目指す新しい機能では、開殻系の扱いではスピン汚染フリーの ROHF 計算の収束性を向上させ、多参照系の扱いでは CASSCF 計算のプロトタイピングを済ませています。「富岳 NEXT」を睨んで重視されつつある AI for Science (AI4S) の文脈に則しては、FMO 相互作用エネルギーのサロゲートモデリング、計算結果の自動解釈の支援ツールの開発を進めました。HPCI 拠点でのライブラリ整備では、ABINIT-MP の各版と共に、タンパク質構造予測システム AlphaFold も手掛けました。

### 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

東京大学 情報基盤センター

名古屋大学 情報基盤センター

大阪大学 D3 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

望月が全体の進捗管理とドキュメントを含めた取り纏めを行うと共に、テスト計算、多参照計算コードのプロトタイピングを手掛けています。坂倉氏（大阪大学）と中野氏（高度情報科学技術研究機構）は、GPU 関係で各々 ABINIT-MP と FMO-X の作業を進めている他、ABINIT-MP の Ver. 2 Rev. 12 の纏め上げを担当しています。土居氏と奥脇氏（立教大学）

は、Python スクリプト群を整備しています。森脇氏（東京科学大学）は AlphaFold2/3 のライブラリ更新を大島氏（九州大学）と共同で実施しています。泰岡氏、平野氏、山本氏（慶應義塾大学）、森氏（九州大学）は MD によるサンプル構造の作成で ABINIT-MP の大規模計算を支援しています。加藤氏（NEC）は、SX Aurora-TSUBASA（以下 SX-AT と略記）でのベクトル版 ABINIT-MP の性能評価を行っています。片桐氏と星野氏（名古屋大学）、中島氏（東京大学）、滝沢氏（東北大学）は HPC の専門家として本課題を大所高所から推進しています。

### 2. 研究の目的と意義

本課題は jh240001 の継続 2 年目に当たり、ABINIT-MP の高速化の対象プラットフォームを「富岳」や東京大学の「Wisteria/Odyssey」等の A64FX スパコンに限定せず、東北大学の「AOBA」や大阪大学の「SQUID」等の SX-AT 系スパコン、さらに「Wisteria/Aquarius」や

JCAHPC の「Miyabi-G」のように GPU を備えたスパコンに対しても広げた研究開発活動を主軸①としています。「富岳 NEXT」のノード構成は昨夏公表されましたが、それを意識して ABINIT-MP とは別に（最初から）GPU 向けの FMO-X を開発する作業を始めています。FMO-X は、(jh240001 課題の申請時に記した)「FMO Reborn」を担う主プラットフォームとなることを意図するものです。

GPU 関係とは別に、ABINIT-MP の機能追加、それに FMO の計算結果の解析環境を整える作業も行っています。これらの周辺整備は、Ver. 2 Rev. 12 に反映されました。当初の予定では GPU 対応は Ver. 3 系からの予定でしたが、それを変更して MP2 エネルギーまで GPU 化した Ver. 2 Rev. 12 の更新版として Rev. 16 を出すことにしました(2026 年度内)。さらに、Ver. 3 系に向けての開殻・多参照系の作業も進めています。なお、ABINIT-MP の更新版、FMO-X は HPCI 拠点でのライブラリ公開を継続します。

副軸の②の活動としては、AlphaFold2/3 の「不老」タイプ II(2026 年 3 月に退役)、九州大学の「玄界」ノードグループ B/C でのライブラリ更新、並びに予測構造の精度検証、さらに応用計算としています。

### 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、構成メンバーの滝沢氏が「AOBA」、中島氏が「Wisteria」と「Miyabi-G」、片桐氏が「不老」(2025 年度で退役し 2026 年度下期から「不老・弐」に更新)、坂倉氏が「SQUID」、大島氏が「玄界」の各スパコンを管轄する拠点の所属であり、公募型共同研究の意味では「前提条件」がクリアされていますが、HPC 系の技術討議・交流も伴って実成果が出ており、実施意義は十分満たされていると考えます。②の AlphaFold についても、上述のようにライブラリ公開をしており、公益性はこちらも

確保されています。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

jh240001 では、①としては以下の進捗成果がありました。(ア) 北海道大学～九州大学のスパコン群に対して ABINIT-MP のライブラリ登録を進めました。Ver. 2 Rev. 8 に加え、福澤薫先生(大阪大学)が主催されている FMODD (<https://fmodd.jp>) コンソーシアムとの交流の再開を受けて「FMODD1-2024」を「富岳」と「SQUID」に入れています。(イ)「玄界」のノードグループ A で、混成並列(OpenMP/MP)実行の際にコア割り当ての連続生成確保のノウハウを南里豪志先生のご指導を得て取得しました。(ウ) NEC SX-Aurora TSUBASA (SX-AT) 向けに 3 次摂動 (MP3) 計算で最もコストの高い「4 粒子-2 空孔」の寄与のルーチンの DAXPY 処理部を高速化しました。(エ) 2 電子積分処理を中心にルーチン群の再構成と OpenACC ディレクティブの挿入によって ABINIT-MP の FMO-HF 計算の GPU 化対応に目処を付けました(JHPCN サイトの jh250002 のページの[5, 6, 14]で発表)。(オ) 超大規模系への対応では、ABINIT-MP 本体の修正と Python スクリプトの整備により、長年の懸案であったスパイクタンパク質の液滴モデルのルーチン処理を可能としました(1 サンプルあたり、「富岳」の 8 ラックで FMO-MP2/6-31G(d) ジョブが約 2 時間)。(カ) スピン汚染の無い開殻 HF (ROHF) の基本動作を確保しました。(キ) 多参照系の扱いの第一選択肢となる CASSCF 法の基幹ユニットである CASCI エンジン(2007 年開発)を現代の環境にフィットさせました。(ク) 3-21G 基底関数による FMO-MP2 計算から、上位基底である 6-31G(d) や cc-pVDZ による FMO 相互作用エネルギー (IFIE/PIEDA) の値をサロゲートする試みを行いました(システムの仮名称は SSIFIEE)。3-21G は sp 関数のみですので、GPU 加速が特に有効となります[1]。

②の AlphaFold 関係は以下です。(ケ)「不老」タイプ II、「玄界」ノードグループ B/C でライブラリとして登録しました。(コ) AlphaFold の予測構造と PDB の基準構造で FMO 相互作用エネルギーを評価・検討し、側鎖の配向では未だ十分な信頼性がないことが示唆されました。

量子計算関係の③は、jh240001 で取り止めたりましたが、次の成果は得られました。(サ)「不老」タイプ II 上での量子シミュレータ cuQuantum による VQE-UCCSD 計算を FMO スキームの条件下、複数 GPU での同時並行処理で実行し、古典パートが深刻なボトルネックとなることを示しました [2, 7]。

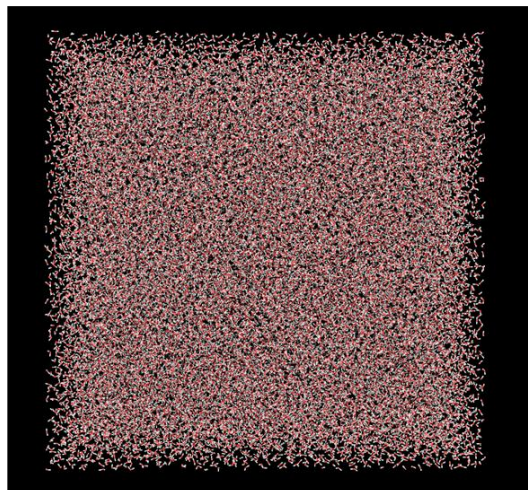


図 1. 40,587 個の水分子のクラスターモデル

## 5. 今年度の研究成果の詳細

jh250002 での ABINIT-MP 関係①の成果の最初に、Ver. 2 Rev. 12 の取り纏め・リリースを挙げます [4, 9, 11] (主担当：中野氏&坂倉氏&望月)。この版の詳細については、リリースノートの [11] に記していますが、最も重要なポイントは、超大型のタンパク質の MD 由来の液滴モデルの FMO-MP2/6-31G(d) ジョブを「富岳」で容易に実行できるようにしたことです。デモンストレーションとなった既出のスパイクタンパク質の系では、ヒトへの感染に関わる RBD 部の様態が異なる 2 種の構造で合計 200 セットを処理しています (H. Doi et al., *J. Comput. Chem.* **46** (2025) e70052)。また、水のみクラスターモデルですが、4 万フラグメントの系 (図 1 を参照) に関し、「不老」タイプ I の半ラックで FMO-MP2/6-31G(d) 計算を 10 時間で完走させています (担当：中野氏)。Python スクリプトによるフラグメントの分割では、タンパク質/DNA/RNA が混在する系 (例：CRISPR-Cas9 システム) にも対応しました。機能の追加では、相対論的な有効内殻ポテンシャル (ECP) の利用を石村和也氏 (クロスアビリティ) の SMASH (<https://smash-qc.sourceforge.io/>) から

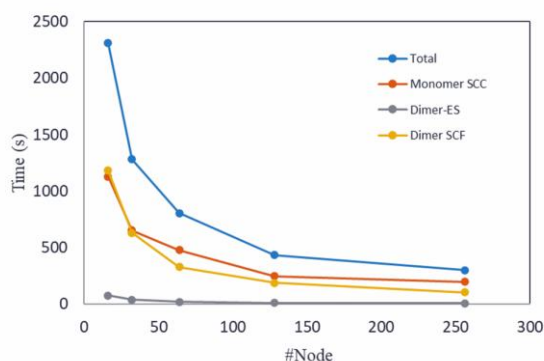


図 2. HIV プロテアーゼの FMO-HF/6-31G ジョブの「Miyabi-G」でのタイミング

の移植にて可能としました (従来はモデル内殻ポテンシャル (MCP) のみ: T. Ishikawa et al., *Chem. Phys. Lett.* **427** (2006) 159)。また、励起エネルギー算定の CIS(D) を追加的に改良 (Y. Mochizuki, *Chem. Phys. Lett.* **472** (2009) 143) しました。Ver. 2 Rev. 12 の HPCI 拠点でのライブラリ登録は、2026 年 6 月から「富岳」を皮切りに始める予定です。

ABINIT-MP の GPU 化についてですが、最初に FMO-HF の結果について示します。実は、2 電子積分のループ階層に関する再構成のやり方で GPU 化担当の中野氏と坂倉氏でアプローチが異なりました。中野氏は、元の ABINIT-MP の基本構造を温存する形で GPU 化を行い、「Miyabi-G」の GH200 の CPU-GPU の NUMA を直截に使った多ノードの実行テストを行い

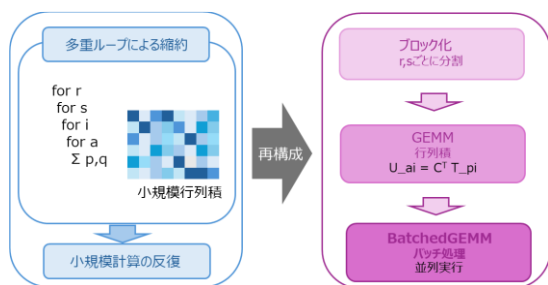


図 3. MP2 計算の GPU 化のための GEMM

処理のバッチ並列化 (模式的に表現)

ました [5, 14]。図 2 に、HIV プロテアーゼ (リガンドとしてロピナビルが結合) の FMO-HF/6-31G ジョブのタイミングを全時間とステップ毎に分けた結果をプロットしていません。モノマー段階、ダイマー段階での加速スケールリングはまずまずで、系が小さいためにダイマー-ES 近似 (HF はスキップ) は少ノードで足りています。全体のスケールは、16 ノード基準として 128 ノードで 8 倍のところ、実効で 5 倍ほどの高速化となっています。

坂倉氏は、2 電子積分の生成と Fock 行列の構築までを軌道角運動量の組み合わせに応じて再構成 (81 種類の積分タイプ毎のルーチン群を対称性を活かして 21 種類のユニークなセットにまで纏める等) する大掛かりな作業を行い、OpenACC を使ってメモリ転送等も明示的指示とする改造を実施しました [6]。その流れを活かし、MP2 エネルギーの GPU 化まで進めています。実は、当初は MP2 エンジン (Y. Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* **457** (2008) 396) の 2 電子積分の 4 回の添字変換の GEMM 処理を cuBLAS に置き換える形の試みを中野氏が別途行ったのですが、残念ながら良い性能が出ませんでした。その理由は、テンソルコア資源に対して演算量が少なすぎるためでした。そこで、図 3 に模式的に示すように積分変換をバッチ的に束ねて処理 (stride-batched GEMM) する形に変更しました [8]。テストでは、Trp-Cage の FMO-MP2/6-31G ジョブを「Wisteria/Aquarius」上で評価しましたが、表 1 にタイミングを示します。

表 1. Trp-Cage の FMO-MP2/6-31G ジョブの「Wisteria/Aquarius」でのタイミング

	CPU(s)	GPU(s)
Monomer SCF	44.6	15.1
Monomer MP2	3.4	2.5
Dimer ES	2.8	1.6
Dimer SCF	83.1	14.1
Dimer MP2	103.4	9.1
Other	6.6	0.8
<b>Total</b>	<b>243.9</b>	<b>43.2</b>

測定の条件は、CPU のみの MPI/OpenMP の並列、MPI/OpenMP+GPU の並列の比較として、10 MPI/70openMP、8MPI/80openMP+4GPU としましたが、5.7 倍の高速化が得られました。MP2 部の加速としては、軌道数の多いダイマーでは約 10 倍と顕著になっています。

MP2 エネルギー計算までの GPU 対応は既述のように Rev. 16 でリリースする予定ですので、今後の作業としては、数百残基規模までのタンパク質での追加テスト、並びに 6-31G(d) や cc-pVDZ での性能評価が必要となります (担当: 中野氏&坂倉氏)。後者では、絶対数が少ない上に演算数とメモリ要求のバランスが GPU には向かない (dd|dd) 積分等は CPU での同時並行処理でよさそうです (要検討)。なお、ここまでのベンチマークテストで sp 関数の 6-31G 基底としてきたのは、IFIE/PIEDA のサロゲートモデル [1] では 3-21G を使う前提があることを付記します。

下期での特記事項としては、FMO-X のプロトタイプ稼働があり、これは中野氏の成果です。FMO-X では 2 電子積分を恒等分解 (RI) により、基底関数の添字 2 つに専用の展開基底の添字 1 つで指定される 3 階テンソルの積和の形で近似します。これにより、メモリ要求が低減されることに加え、行列積型の GPU 向き処理で HF と MP2 の基本計算が可能となります。また、cc-pVDZ より上位の cc-pVTZ の使用も容易になります。環境静電ポテンシャル (ESP) 関係等の作りこみは未だですので、

```

subroutine work1(n,a,b)
implicit none
integer, intent(in) :: n
real(kind=8), intent(in), dimension(n) :: a
real(kind=8), intent(out), dimension(n) :: b
integer :: i
real(kind=8) :: t ! ここをベクトル化したい
do i = 1, n
t = a(i)
call work2(t) ! ルーチン呼び出しやループがあり最内でない
b(i) = t
end do
return
end subroutine work1

subroutine work2(t)
implicit none
real(kind=8), intent(inout) :: t
t = sin(t)
return
end subroutine work2
    
```



```

subroutine work1(n,a,b)
implicit none
integer, intent(in) :: n
real(kind=8), intent(in), dimension(n) :: a
real(kind=8), intent(out), dimension(n) :: b
integer, parameter :: blkksz = 256 ! ブロックサイズ
integer :: i_, ib, ll
integer :: i
real(kind=8), dimension(blkksz) :: t ! tはサイズblkkszの配列に
do i_ = 1, n, blkksz ! Blocking外側ループ
ll = min(i_+blkksz-1,n)-i_+1 ! 内側ループ回転数ll
do i = i_, min(i_+blkksz-1,n) ! Blocking内側ループこれをpush
ib = i-i_+1
t(ib) = a(i)
end do
call work2(t,blkksz,ll)
do i = i_, min(i_+blkksz-1,n)
ib = i-i_+1
b(i) = t(ib)
end do
end do
return
end subroutine work1

subroutine work2(t,blkksz,ll) ! ブロックサイズとループ長
implicit none
integer, intent(in) :: blkksz, ll
real(kind=8), dimension(blkksz), intent(inout) :: t
integer :: ib
do ib = 1, ll ! ここでベクトル化される (ベクトル長256)
t(ib) = sin(t(ib))
end do
return
end subroutine work2
    
```

図 4. ループプッシングの模式例

アダマンタンの RI-HF/cc-pVTZ 計算を「Miyabi-G」の 1 ノードでテストした暫定タイミングを記しますが、CPU のみで 36.7 分、GPU を加えて 6.4 分です。2026 年度は、RI 積分の生成アルゴリズムの改良、GEMM 処理の最適化と共に ESP 計算部の RI 化を進めていきます。

次に、エネルギー微分（力）計算の構造最適化に関わるエネルギー微分についてです。FMODD コンソーシアムとの交流再開から、理論創薬の現場では最重要なファーマコフォアでの部分構造最適化の要求が高いことを

再認識しました。HF レベルでは、変分原理から軌道変化に関する CPHF を解かずに済むために「核座標で微分された 2 電子積分」の計算が主となりますが、角運動量の増加に伴ってループ最深部での演算処理が増加します。調査の結果、混成並列で OpenMP 導入が一部未実施の残存箇所が判明したため、是正しました（担当：坂倉氏）。また、SX-AT 向けのベクトル化チューニングではループプッシング（図 4）を「微分化 2 電子積分」のルーチン群に適用しており、2026 年度も継続します（担当：加藤氏）。MP2 エネルギー微分については CPHF 求解が必要ですが、関連する密度行列の計算は行列積型でコーディングされているためにベクトル化加速の恩恵が受けられるはずで

ここで、Ver. 3 系で提供予定の非閉殻系対象の計算手法の進捗[4, 9]に話を移します。スピン汚染の無い開殻 HF (ROHF) では、開殻部を除いた仮想的な閉殻を一旦解いてから開殻をアドオンする二段階で C2-DIIS (H. Sellers, *Intern. J. Quant. Chem.* **45** (1993) 31) を使って収束させる方法 (MOON) とし、金属錯体でも十数回の反復で  $10^{-8}$  のエネルギー収束が得られるようになりました（担当：中野氏）。2026 年度は、通常の 2 体 FMO に加え、3 体 FMO (FMO3)、重要領域設定の階層化 FMO (MFMO) のフレームワークで利用可にします（担当：中野氏）。また、ROHF 参照の RMP2 (P. J. Knowles et al., *Chem. Phys. Lett.* **186** (1991) 130) を UMP2 モジュールを転用して実装します（担当：望月）。

多参照系の扱いの基本手法としては、CASSCF (B. O. Roos et al., *Chem. Phys.* **48** (1980) 157) の一択となります。CASSCF は、積分変換-CASCI 求解-軌道最適化をサイクルで収束まで繰り返します。これら一連の処理を、複数プログラムをファイル経由で連携させるシェル駆動でプロトタイピングしました（担当：望月）。CASCI ステップには、ス

```

**** CASSCF ITERATION HAS CONVERGED FORTUNATELY ****
ITR.  CASCI-ENERGY  SX-CI-ENERGY  REF. COEF.
  1   -1336.2567900  -0.0073784    0.9987478
  2   -1336.2691291  -0.0029545    0.9994209
  3   -1336.2738359  -0.0011107    0.9997582
  4   -1336.2756725  -0.0004914    0.9998856
  5   -1336.2765047  -0.0002419    0.9999408
  6   -1336.2769213  -0.0001282    0.9999675
  7   -1336.2771447  -0.0000715    0.9999814
  8   -1336.2772705  -0.0000414    0.9999890
  9   -1336.2773436  -0.0000246    0.9999934
 10   -1336.2773872  -0.0000148    0.9999960
 11   -1336.2774136  -0.0000091    0.9999975
 12   -1336.2774297  -0.0000056    0.9999985
 13   -1336.2774397  -0.0000035    0.9999990
 14   -1336.2774459  -0.0000022    0.9999994
 15   -1336.2774498  -0.0000014    0.9999996
 16   -1336.2774523  -0.0000009    0.9999998
 17   -1336.2774538  -0.0000005    0.9999999
 18   -1336.2774547  -0.0000003    0.9999999
 19   -1336.2774553  -0.0000002    0.9999999
 20   -1336.2774557  -0.0000001    1.0000000
 21   -1336.2774560  -0.0000001    1.0000000
 22   -1336.2774561  -0.0000001    1.0000000
 23   -1336.2774562    0.0000000    1.0000000
 24   -1336.2774563    0.0000000    1.0000000

```

図 5. 3 重項[FeO]<sup>2+</sup>の CASSCF/6-31G(d)の収束状況

レーター行列式でなくスピン適合型励起配置 (CSF) の展開による自主開発の並列化プログラム (K. Tanaka et al., *Theor. Chem. Acc.* **117** (2007) 397) を用いています。軌道最適化は、CASCI 空間を内部縮約で扱う Super-CI ベースの上出の *Chem. Phys.* 版、有効 Fock 行列の扱いがより厳密な版 (B. O. Roos, *Intern. J. Quant. Chem. Symp.* **14** (1980) 175.) の 2 系統を独自の小改良を入れて実装しました。Super-CI では、妥当な近似によって変換積分は (act, act|act, all) タイプだけで済みますので、メモリ量は少なくなります。反復回数は、HF の仮想軌道をそのまま使う場合で、{CH<sub>2</sub>, NH<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>} 等は 10~15 回程度で小数 6 桁以下のエネルギー収束が得られます。FMO の応用計算の上で重要なターゲットとなる P450 酵素 (CYP) は、コアのポルフィリン部中心に [FeO]<sup>2+</sup> を持ちます。そこで、単体イオンを「10 電子 8 軌道」の設定で計算してみました (基底関数は 6-31G(d) で、Fe-O 距離は 1.7346 Å)。初期軌道として 5 重項の ROHF のセットを使い、先ず 5 重項の CASSCF を解き、その自然軌道セットで 3 重項を計算し直しました。図 5 にエネルギーの収束状況を示しますが、収束に向かって内部縮

約 CASCI 空間の係数が 1 に近づくことが確認できます。CAS の自然軌道の占有数は {1.9930, 1.9809, 2 x 1.3281, 1.0142, 0.9998, 2 x 0.6779} となっており、単一配置の扱いは完全に破綻していることがわかります。他に 7 重項も解けていますが、各スピン状態で本プロトタイプと同じ CSF 展開の CASSCF を持つ DALTON (<https://daltonprogram.org/>) と全エネルギーと自然軌道が対応することを確認しています。一方、CASCI を行列式展開で扱う某プログラムでは 5, 7 重項はスピン汚染された不正状態に収束してしまい、CSF 展開の必然性が示されました。CASSCF の本実装は、積分処理の利便性から (プロトタイプを活かして) Super-CI ベースで 2026 年度内の予定です (担当: 望月)。

CASSCF の後で CASCI を参照とする 2 次摂動では、CASPT2 (K. Anderson et al., *J. Phys. Chem.* **94** (1990) 5483) が高名ですが、size-consistency が担保され、励起振幅の繰り返し最適化が不要な NEVPT2 (C. Angeli et al., *Chem. Phys. Lett.* **350** (2001) 297 & *J. Chem. Phys.* **117** (2002) 9138) を採用することにしました。ただ、実装に必要な数式群は CASPT2 より複雑で難度が上がります。前出の並列化 CASCI エンジンの開発者の田中皓先生 (北海道大学名誉教授) と連携して NEVPT2 の実装準備をしてきましたが、2025 年度の末で一通り数式セットの独自整理が終わりました。また、田中先生は CASCI エンジンを改造して NEVPT2 で必要な 3 体と 4 体の密度行列の計算まで因子分解アルゴリズムで拡張して実装されました。NEVPT2 のプロトタイピングでは、CAS 空間の強縮約 (SC) と部分縮約 (PC) の両方のスキームを 2026 年度内に行う予定で、DALTON に内蔵された NEVPT2 のオリジナル実装版のエネルギーとノルムを参照します (担当: 望月)。

ここまで、①のプログラム関係の成果をまとめましたが、AI for Science (AI4S)

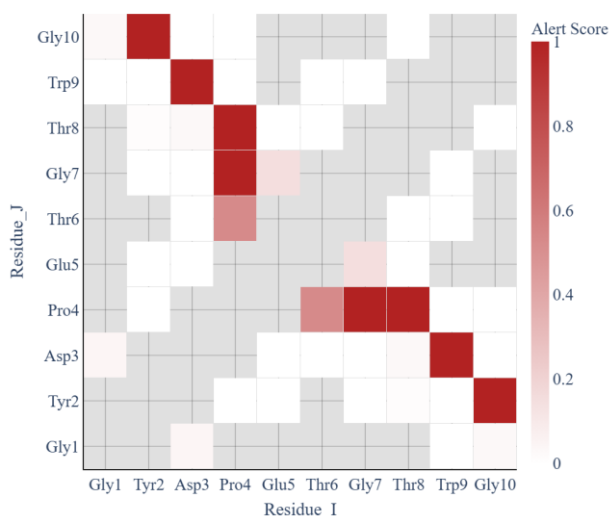


図 6. Chignolin の相互作用残基の帰属ズレのアラート

文脈の成果で、Python スクリプトによるサロゲートモデル[1]の応用についてここで記したいと思います。FMO コンソーシアムでは、FMO 計算結果のデータベース (FMO DB) 化を推進しており、SCOP2 の構造群を準自動化プロトコルで FMO-MP2 レベルで計算して公開しました (D. Takaya et al., *Sci. Data* **11** (2024) Art. No. 1164)。基底関数は、{6-31G(d), 6-31G(d,p), cc-pVDZ} の 3 種が使われました。FMO-MP2/3-21G でのサロゲートで、これらの計算結果のトレースを試みたところ、6-31G 系ではリーズナブルな  $R^2$  が得られましたが、論文[1]に報告したのと同様に cc-pVDZ については不十分な結果となりました[10] (担当: 土居氏&奥脇氏)。SCOP2 の構造セットのバラツキ等の再検証も必要ですが、サロゲートモデルの改良を 2026 年度に行います (担当: 中野氏&土居氏&奥脇氏&望月)。

2025 年度、MD-FMO 連携による多構造サンプルの相互作用解析をサポートする Python ツールも開発しました[3] (担当: 土居氏&奥脇氏&望月)。通常の 2 体の FMO 計算では、ペプチド結合ではなく  $C_{\alpha}$  部でフラグメント分割を行うため、ペプチド結合のカルボニル酸素が水素結合や配位結合に関わる場合、残基帰属のズレによって実験的・経験的な知見と不整合が発生してしまうことがあります。

これは要注意で、ズレの認識と修正に関する「属人性」が FMO 業界で長年の課題となってきました (特に、学生等の新参の FMO 計算利用者はミスしやすい)。そこで、独自の数値指標に基づいて計算結果からズレを検知・判定するシステム (名称は SARASA) を造りました。図 6 は、10 残基の Chignolin でのテスト例で、帰属ズレを検出された残基対が赤でマークされています。SARASA は、FMO DB の豊かな結果データの解釈と知識導出の自動化への準備への準備と位置づけられます。2026 年度以降は、さらに相互作用様態 (水素結合、CH/ $\pi$  等) の判定のための Python ツールの作成を試みたいと考えています (担当: 土居氏&奥脇氏&望月)。

既述のように、Ver. 2 Rev. 12 では超大型の液滴モデルの実行が (「富岳」では) 容易に可能となりましたが、それを下支えしているのは様々な Python ツールです。結果の解析では、田中成典先生 (神戸大学) とのコラボレーションによってデータ科学手法の導入も進めてきていますが、2025 年度は MD-FMO で時間軸・サンプル軸を持つ相互作用エネルギー行列・テンソルの特異値分解関係のツール整備を進め、鳥インフルエンザウイルスの RBD 部の状態変化の解析に適用しています (「富岳」の感染症対策関係の課題で実施)。

AF 関係の②についてですが、ライブラリ整備としては[12, 13, 15]になります (担当: 森脇氏&大島氏)。なお、「不老・忒」では SIer が AF のインストールを行うことになりそうです。森脇氏は、ご自身の AF 応用として[16]を公開されています。

最後にご参考の情報となりますが、東京化学同人の雑誌「現代化学」に 2026 年 4 月号から FMO 関係で全 12 回の記事連載が始まっています。5 月号 (第 2 回目) では超並列処理と GPU 対応を記しています[17] (担当: 中野氏&坂倉氏&望月)。

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

jh250002 の進捗状況の自己評価に関しては、95 点としたいと考えます。理由は、当初予定をほぼ達成した上に FMO-X のプロトタイプの稼働を得たことです。-5 点は、2025 年度内に Ver. 2 Rev. 12 の HPCI 拠点でのライブラリ登録を始められなかったためです。

ここ 1 年間では、継続採択をいただいた jh260001 の活動の中、ここまで記してきた予定・計画を実施していくことが重要です。数年スパンでの「今後」としては、「富岳 NEXT」の 2030 年（頃）の稼働までに、GPU 対応と AI4S を共にしっかりと進めることも必要です。技術要素としては、低精度演算の導入が先ずあります。量子化学分野の先行事例 (W. Dawson et al, *J. Chem. Theory Comp.* **20** (2024) 10826) もあり、GPU での実行では導入は不可避と思われます。具体的には、ESP 関係での試行と検証が最初のステップと考えられます。また、2 電子積分 (RI を含む) の生成や電子相関計算におけるテンソル縮約の処理ループの最適化での大規模言語モデル (LLM) 系ツールの利用を視野に入れておくべきです。自動コードチューニングは、アンソロピックの Claude に代表されるように進歩が急速ですが、幸い、HPC 分野の本課題参加の各氏が既に手掛けられている (片桐氏の jh250015/jh260017 等) ので、その技術をいかに上手く ABINIT-MP や FMO-X に反映させていくかがポイントになります。もう 1 つの要素は、サロゲートモデル関係で所謂ニューラルネットワークポテンシャル (NNP) を導入して、近似の階層性を入れることです。これは、MD シミュレーションの時間を  $\mu$  秒オーダーまで伸ばして液滴のサンプル数が一桁ないし二桁増える際に有効と思われます。