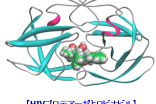


FMOプログラムABINIT-MPの次世代化

課題代表者: 望月祐志(立教大) / 共同研究者: 中野達也(RIST), 坂倉耕太(阪大), 片桐孝洋, 星野哲也(名大), 大島聡史, 森義治(九大), 中島研吾(東大)
森脇吉隆(科学大), 滝沢寛之(東北大), 加藤季広(NBC), 泰岡順治, 平野秀典, 山本詠士(慶應大), 土居英男, 奥脇弘次(立教大)

フラグメント分子軌道(FMO)法

- ◇巨大分子系
生体高分子や凝集系では一般的
⇒ タンパク質、DNA (水和状態)
数千〜数万原子、数千〜数十万軌道



- ◇分割&統合系のアプローチの一つ

- 北浦らが1999年に2体展開で提案
⇒ フラグメントとその対でエネルギーを評価 (FMO2)
⇒ 環境静電ポテンシャル (ESP)、直接結合切断 (BDA)
⇒ 段階的な並列処理 (フラグメントリスト&内部処理)
⇒ 定量化を高める電子相関の導入も直感
フラグメント間の相互作用エネルギー (IFIE)
⇒ 計算対象の解析ツール
⇒ 生物物理や創薬に向く
⇒ 材料系にも適用可能



リリース状況のまとめ (2024年9月時点)

- ◇Ver. 1系の最終リリース版はRev. 22 (2020年6月3日)
関数のサポート (直交10成分のみ)
MFMOによる指定領域でのみのMP2&MP3計算
加速されたPIEDA (「富岳」の新型コロナウイルスの中で改良)

- ◇「富岳」時代でVer. 1からVer. 2へ移行 - Open Ver. 2 Rev. 4 (2021年9月16日)
単一構造サンプルでの可視化解析の「限界」
統計的な相互作用解析の重要性 (MDベースで百〜千サンプル構造を対象)
大規模系の扱いの必要性 (タンパク質の液滴モデルは数万フラグメントに)
可視化ツールによる解析を「諦め」(ダンプ用データがメモリを圧迫)
HPC分野の専門家とコラボしての高速化 (特に「富岳」などのA64FX向け)
基本のMP2計算ではVer. 1 Rev. 22で1.2〜1.4倍の加速

- ◇最新リリース版 - Open Ver. 2 Rev. 8 (2023年8月25日)
PIEDA機能の強化 (分散力寄与との区別、静電相互作用のRESP評価)
多層FMOでの励起エネルギーとオノン化エネルギーの算定
更なる高速化を実施、MP2計算はVer. 1 Rev. 22で1.5〜2倍の加速
素で2万フラグメントの液滴モデルの扱い (「富岳」では多サンプル処理が可)

GPU対応の必要性

- 背景
・GPU&パソコンの普及
⇒ 「Wisteria」Aquarius, 「不老」Type II, 「玄界」NG-B, 「JHPCN」Miyabi
⇒ 使われている分野はAI、量子シミュレーション、MD...
・「富岳NEXT」
⇒ ノード構成でCPU(2基)に加えて「演算加速器」(4基)の搭載
・MO系の計算がGPUに対応済
⇒ 高名なTeraChem、GAMESS-USも対応 (GPU化FMO専用EXCESSも在り)
⇒ 国内でも先行例在り (OpenFMOなど)

- 対応策
・ABINIT-MPも2電子積分生成などのGPU化が必要
⇒ HFのミニアプリでの検討を先ず実施 (NVIDIAの成瀬氏)
⇒ 6-8倍の加速を確認
・ABINIT-MP本体のGPU対応を推進中 (主担当は坂倉氏)
⇒ 積分ルーチン群の再構成 (81種〜21種へ低減)
⇒ 24年度 (h240001) でFMO-HFまでほぼ完了 (6-31G基底でテスト)
⇒ 2025年度 (jh250002) でFMO-MP2まで達成の予定

総説論文: ABINIT-MPの現況と今後

Abstract: The fragment molecular orbital (FMO) program ABINIT-MP has a quarter-century history, and related research and development of the Open Version 2 series is currently underway. This paper summarizes the current status of the latest Revision 8 (released on August 2023). It also discusses future improvements and enhancements, including GPU support. The connection with coarse-grained simulation (dispersive particle dynamics) and the possibility of comparison with quantum computation are also included here.

キーワード: Fragment molecular orbital, FMO, ABINIT-MP, GPU, Coarse-grained simulation

総説論文

ABINIT-MPの現状と今後

望月 祐志¹, 中野 達也², 坂倉 耕太³, 土居 英男⁴, 加藤 季広⁵, 森 義治⁶, 滝沢 寛之⁷, 大島 聡史⁸, 星野 哲也⁹, 片桐 孝洋¹⁰

GPU化の重要性を明記
開発・多参照系への対応も記載

2電子積分のRI近似: テンソル次数の低減

MP2 correlation energy (E^{MP2})

Loop over I # Parallelized

$$X_{I,jl} = \sum_k C_{I,jk} C_{kl} \quad \# \text{DGEMM}$$

Loop over J # Parallelized

$$Q_l = \sum_k L_{I,jk} P_k \quad \# \text{DDOT}$$

Loop over IJ # Parallelized

$$R_{IJ} = Q_{IJ} + L_{I,jk} Q_{kl} \quad \# \text{DAXPY}$$

End of loop over IJ

ALLREDUCE ($\bar{U}_{IJ}$)

Exchange matrix (K)

$$\bar{K}_{IJ} = 0$$

Loop over IJ # Parallelized

$$X_{I,jl} = \sum_k L_{I,jk} C_{kl} \quad \# \text{DGEMM}$$

Loop over IJ # Parallelized

$$\bar{K}_{IJ} = \bar{K}_{IJ} + \sum_k X_{I,jk} X_{kl} \quad \# \text{DGEMM}$$

End of loop over IJ

ALLREDUCE ($\bar{K}_{IJ}$)

① 対応は最適化基盤を別途準備
② 基底関数は無関係、内蔵動機は1

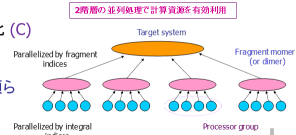
FMO計算のためのプログラム

- ◇GAMESS-US [米国Gordonグループ]: Fedorov/Gordonら
GAUSSIANに抗し得る有力なフリーソフト、世界規模 (Fortran)
⇒ 様々な機能をFMO化、多彩な計算、GDDI並列

- ◇ABINIT-MP: 望月、中野ら
実用機能は十分、東大系PJ-CREST-PJなどで開発 (Fortran)
⇒ IOレス、MPI、OpenMP/MPI混成並列、スパンと好相性

- ◇PAICS: 石川
FMO-MP2(RI)に特化 (C)
⇒ MPI並列

- ◇OpenFMO: 稲富、鬼頭ら
FMO-HF (C)
⇒ 超並列指向



HPCI拠点でのライブラリ整備 (2025年4月)

HPCI	System name	V1R22	V1R24	V2R8	DD1.24
Hokkaido Univ.	Grand Chama	○	○	○	○
Tohoku Univ.	AOBA-A-S*	○	○	○	○
Utsunomiya Univ.	Witsuna-O/A	○	○	○	○
Tokyo Inst. Tech.	TSUBAME4.0	○	○	○	○
JAMSTEC	ES*	○	○	○	○
NIS	RCCS	○	○	○	○
Nagoya Univ.	Flow Type J-LI	○	○	○	○
Osaka Univ.	Camogie 3	○	○	○	○
Kyoto Univ.	SCUD*	○	○	○	○
FOCUS	System A	○	○	○	○
R-CCS	Fugaku	○	○	○	○
Kanagawa Univ.	Onizuka	○	○	○	○

● University
● Other facility

Ver. 1 Rev. 22はGUIユーザー向けに選択
・DD1.24はFMODDによるVer.1系の2024年度更新版
・FMOはSK-Aurora/TSUBAME4.0に対応
・FMOのGrand Chama 2 (後継)は2025年夏から稼働

Ver. 2 Rev. 12 (最終Rev)も同様に整備の予定

GPU化のイメージ (モノマー段階)

do SCC-iteration
do monomer-Loop
CPI並列
do SCF-iteration
do I-Shell
do J-Shell
CPI/OpenMP並列
do K-Shell
do L-Shell
select case (ang-type)
計算用の2電子積分計算
do ip
do jq
do lk
calc ERI

GPU化

軌道角運動量タイプ別に集約したルーチン構造に改変

これからの「次世代化」

- ABINIT-MPの整備を維持: 基本路線
・既存機能も多いため全てをGPU化するのは非現実的、flat MPIのみの機能も複数
・利用者が多数、特に理論創薬関係の大ユーザーがFMODDの存在
⇒ FMO-MP2計算までのGPU対応は確保、Ver. 3系でリリース (2026年度内)
⇒ 4層モデルの2電子積分ではGPU加速で2〜3倍の加速が「限界」か
・開発、多参照系の対応が進行中 (生体内ラジカル、金属酵素の扱い)
⇒ ROHFは動作済、2025年度内にMP2ならびにCASCFのプロトタイプ
- FMO-X列に開発: 発展路線
・GPU対応を最初から意識、環境静電ポテンシャルでは混合精度演算も検討
・2電子積分は3層のRI近似、DGEMM処理がメイン
・FMO-MP2エネルギー微分まで (米家によるEXCESSを参考)
⇒ 構造最適化とMDシミュレーションが可能
・Fortranベースで先ず開発、ABINIT-MPからのモジュールは調整して流用
⇒ AIベースの最適化ツールでカーネル部の言語転換を想定
⇒ チューニングもAIツールを利用 (最適な実行環境設定も重要)
・「富岳NEXT」上で実5万フラグメントのルーチン実行を意図
・Pythonスクリプトによる入出力データ処理、機械学習との親和性
⇒ FMO相互作用データベースとの接続 (FMODDコンソのFMODD)
⇒ 計算結果の解釈の自動化、サロゲートモデルによるコスト低減

開殻系と多参照系の扱い

■開殻領域
・UHF: UHF2のエネルギーはFMO3レベルで実演済; UHFではエネルギー微分も可能
・スピン汚染の問題から実際の応用はこれまで困難; 特: 遷移金属イオンを主系
・スピン汚染の無い ROHF を実装中; 多層FMOの扱いに活性中心を扱う
・電子相関の補正はRMP2を実装予定; UMP2の積分交換シミュレーション

■多参照領域
・CASCFが第一選択; 14軌道/14電子問題までを想定 (計費次第)
・任意の基底に対してスピン汚染の問題の無いCSFベースの並列化CASCIエンジンを開発済
・軌道最適化は1次1近道2収束法を想定して設計; 2025年度中に実装予定
・相関補正はNEVPT2を検討中; 4倍密度行列処理のためにCASCIエンジンの拡張が必要

FMO-HF

(MP2, MP3)
(CISD, CPT)
(ROHF, RMP2)
(CASCF, NEVPT2)

ABINIT-MPの主な機能 (オープンシリーズとして整備中)

- ・エネルギー
⇒ FMO4: HF, MP2
⇒ FMO2: HF〜CCSD(T), LRD
⇒ FMO2: CIS/CIS(D)
- ・エネルギー微分
⇒ FMO4: HF, MP2
⇒ FMO2: MP2構造最適化, MD
- ・その他機能
⇒ SCIFIE, PB, sp2-BDA, α(ω)
⇒ 電子密度生成, CAFI, FILM
- ・並列化環境 (PC〜スーパーパソコン)
⇒ MPI, OpenMP/MPI混成
⇒ 最深部はBLAS処理

ABINIT-MPの大規模系への対応例

Large-Scale FMO-MP2 Calculations of the Spike Protein Droplet Model

Abstract: The spike protein of SARS-CoV-2 is a challenging target for theoretical approaches. Here we report a benchmark calculation of the spike protein droplet model by the fragment molecular orbital (FMO) at the second-order Møller-Plesset perturbation (MP2) level on the supercomputer Fugaku. One hundred structured samples from molecular dynamics (MD) simulations were used for both the closed and open forms of this protein (FDB 1bA3L2 and A3M0 respectively). The number of total fragments is about 30,000, and the job time per structure was about 2h on 8 nodes of Fugaku.

Keywords: droplet model, FMO, fragment molecular orbital method, MP2, second-order Møller-Plesset perturbation, spike protein, supercomputer, Fugaku

液滴モデル中のイオンを点電荷で置換
2万フラグメントのFMO-MP2が容易に

FMO-HF計算のGPU加速性能の評価 @ Miyabi-G

Trp-Cage (20 residues) / 6-31G						
routine	GPU	10MPL_70MP	1MPI	8MPI	8MPI	8MPI
			+1GPU(s)	+10GPU(s)	+10GPU(s)	+4MIG(s)
set_nshatable		-	18.0	2.1	2.0	
direct_scf_gmat	✓	60.3	47.1	15.9	25.3	
monomer_esp_ele	✓	3.5	1.9	1.3	1.3	
dimer_esp_ele	✓	2.1	1.2	1.6	1.5	
dimer_esp	✓	1.4	5.3	1.2	1.4	
monomer_esp_ptc		0.7	26.5	1.8	0.9	
dimer_oneint		1.4	43.3	2.7	0.7	
others		25.9	45.9	31.4	23.8	
Total		94.4	189.2	58.0	56.9	
			x3.3	x3.3	x1.6	x1.7

・精度が異なるルーチンの非同期処理によりMPI,MIGは有効
・MP2,MIGの効果も同程度
・積分計算用の作業配列のCPU→GPUコピーのコスト大<others

ABINIT-MPの関連整備

- SX-AT
・東北大、阪大、JAMSTECのSX-AT機に対応
・MP3エネルギーまでベクトル化チューニング済
⇒ VE208からVE30Aまでの加速は期待でき
・2025年度はエネルギー微分に注力
⇒ 構造最適化を基盤
- AlphaFold(AF2/AF3)
・DeepMind社のタンパク質構造予測ツール
⇒ 2024年の「ノーベル化学賞」
・残基結合の情報 (FASTA) のみで予測
⇒ 高精度解析無しで構造を構築
⇒ 構造生物学分野でも普及
⇒ 感染経路にも有効
・実行処理に大容量のDRAMが必要
⇒ SSDの利用がポイント
・名大、九大でライブラリ整備済
・側鎖の配向、タンパク質の複合体は注意
⇒ MDによる緩和処理が必要

FCI=CASCI)エンジン

A graphical symmetric group approach for a spin adapted full configuration interaction: partitioning of a configuration graph into sets of closed-shell and open-shell graphs

Keywords: Spin adapted FCI, GSXA, Intermediate configuration-driven algorithm, Parallel processing

① スピン適合のCSF展開
② 行列要素計算よりコンパクトで精密
③ MPIベースの並列化