

25年度概要

本課題では、**計算化学の専門家とHPCの専門家との異分野間コラボレーション**によって、FMO計算の自主開発プログラムの改良を中心に活動を行っています。
 ① FMO関係では、多岐にわたる項目を実施しています。先ず**ABINIT-MP**関係では、(I) 超大規模系に対応した**Version 2 Revision 12**の取り纏め(2026年3月)、(II) HFとMP2エネルギー計算の**GPU化**と性能評価、(III) SX-Aurora TSUBASA向けの**ベクトル化**の推進、(IV) 開設系の**スピン制限付きHF計算(ROHF)**の収束性向上、(V) 多参照系に対する基本近似である**CASSCF**のプロトタイピングの完了、(VI) 多参照系の2次摂動論**NEVPT2**の数式セットの導出完了、の6項目があります。また、「**富岳NEXT**」での運用を意識した新規開発のFMOプログラム**FMO-X**については、(VII) 2電子積分の恒等分解(RI)近似に基づくHFとMP2の基本動作をプロトタイプで確保、を達成しました。**AI for Science (AI4S)**関係では、(VIII) 3-21G基底で6-31G(d)やcc-pVDZ基底の相互作用エネルギーを予測する**サロゲートモデル**の試行、(IX) ペプチド結合の>C=O部の残基帰属ずれの自動検出ツール**SARASA**の開発、の2項目があります。
 ② タンパク質の立体構造をアミノ酸配列から予測できる**AlphaFold2/3**を名古屋大学と九州大学のGPU搭載機で一般公開ライブラリとして整備しました。

25年度特記成果

ここでは、jh250002課題で達成した項目の中で**ABINIT-MP**と**FMO-X**に関する特記項目を挙げます。
 ・ ABINIT-MP: Miyabi-G上で複数の系で**GPU化FMO-HF/6-31Gジョブ**をテストし、HIVプロテアーゼでは16ノード基準で128ノードで5倍の加速を得ました(図1)。
 ・ ABINIT-MP: GPUでのMP2の**積分変換をバッチ**で行う(図2)新モジュールを作成しました。Aquarius上のテストでは、1CPUに対し+8GPUで7.5倍の加速です。
 ・ FMO-X: **RI積分ベース**でDGEMMIによるMP2処理(図3)を行えるプロトタイプモジュールを確保しました。

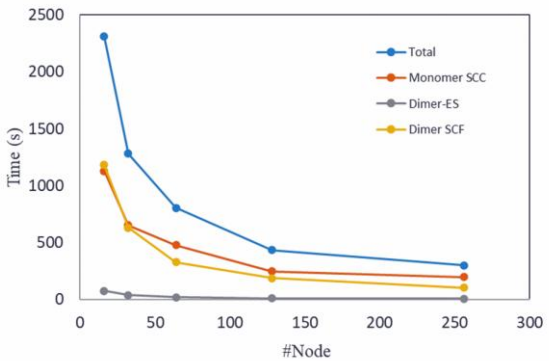


図1: FMO-HF/6-31GジョブのMiyabi-Gでのタイミング例

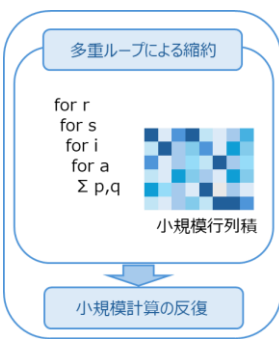
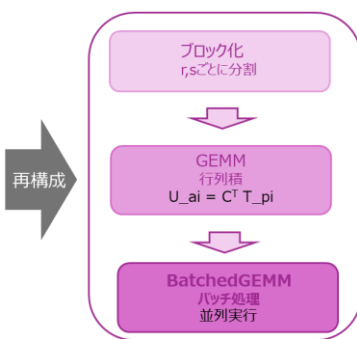


図2: MP2でのGEMM処理のGPU向けのバッチ化



MP2 correlation energy (E^{MP2}) ($pg | rs$) $\approx \sum_l L_{l,pg} L_{l,rs}$

Loop over l # Parallelized

$$X_{l,pi} = \sum_r L_{l,pr} C_{ri} \quad \# \text{ DGEMM}$$

$$B_{l,ia} = \sum_q X_{l,qi} C_{qa} \quad \# \text{ DGEMM}$$

End of loop over l

$$E^{MP2} = 0$$

Loop over ij # Canonical ij pair

$$(ia|jb) = \sum_l B_{l,ia} B_{l,jb} \quad \# \text{ DGEMM (partial sum of 1)}$$

ALLREDUCE (ia, jb)

$$E^{MP2} = E^{MP2} + \frac{(2 - \delta_{ij})[(ia|jb) - (ib|ja)](ia|jb)}{\epsilon_i - \epsilon_a + \epsilon_j - \epsilon_b}$$

End of loop over ij

図3: RI近似積分によるMP2エネルギー計算

26年度予定

継続となる26年度、①では下記に列挙する項目の実施を予定しています。
 ・ ABINIT-MP: 開設系の**ROHF**と2次摂動(RMP2)の{FMO2, FMO3, MFMO}スキームでの実装、並びに多参照系の**CASSCF**のMFMOスキームでの本実装。
 ・ ABINIT-MP: **NEVPT2**のプロトタイプの動作確保、テンソル縮約ループの**AIツールによる最適化**。
 ・ ABINIT-MP: FMO-MP2エネルギーまでのGPU化の**チューニングの徹底**、それを受けての**Version 2 Revision 16**の2027年3月までの取り纏め。
 ・ FMO-X: RI積分生成のGPU高速化、**環境静電ポテンシャル**のRI近似でのGPU化と各種の近似導入。
 ・ AI4S: **サロゲートモデリング**の精度向上、FMO計算結果の物理化学的セマンティックに対応した**自動解釈ツール**のプロトタイピング。
 また、②では下記を想定します。
 ・ AlphaFoldの更新版の「**玄界**」等のNISでの**ライブラリ整備**の継続。

用語解説

- フラグメント分子軌道(FMO)法: タンパク質などの巨大生体分子をフラグメント(アミノ酸単位等)に分割して、静電的な埋め込み条件の下、並列処理を駆使して高速に処理できる手法です。計算結果として、フラグメント間の相互作用エネルギー(IFIE/PIEDA)が得られるため、生物物理学や理論創薬で重用されています。
- MP2: ハートリーフォック(HF)の後、2次摂動論で電子相関を取り込んで定量的な相互作用エネルギー解析を行える計算レベルで、FMOでは最もよく使われています。
- RI近似: 2電子積分を近似的な恒等分解(Resolution-of-Identity)によって3階のテンソル化して行列積指向の処理を可能とする手法です。
- 開設・多参照系: 鉄イオンなどを中心を持つ金属酵素が該当し、その扱いのための計算法(CASSCF/NEVPT2)の実装は通常の開設系に比べて難度が上がります。