

2021年12月22日、BlueJeansを使ったオンライン形式でフラグメント分子軌道(FMO)計算プログラム ABINIT-MP に関するハンズオンセミナーが実施されました。ABINIT-MP は、20年以上に渡って研究開発が続けられており、現在は Open シリーズとして Ver. 1 Rev 22 (2020年6月リリース)と Ver. 2 Rev. 4 (2021年9月リリース)が併存にて、「富岳」を頂点とする国内 HPCI センター群にライブラリ提供されており、「Wisteria/BDEC-01」でも A64FX 系の Odyssey、Xeon 系の Aquarius の両方に導入されています。実装されている機能によって、両者の実行環境を適宜使い分けていただくためです。

今回のハンズオンセミナーは、(一財)高度情報科学技術研究機構(RIST)の主催で、東京大学情報基盤センター、東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター、「富岳」成果創出加速プログラム課題『スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用』(東京大学工学部拠点)に共催をいただきました。

可視化インターフェースである BioStation Viewer を用いる関係で、Ver. 1 Rev. 22 の利用で進めました。実施担当者は望月の他、望月研究室の研究員の奥脇弘次氏(図1を参照)、それにジョブ投入や可視化操作などをデモンストレーションする学生の秋澤和輝氏でした。また、情報基盤センターの中島研吾先生には Wisteria システムのご紹介をいただきました。ハンズオンセミナーの参加者数は、民間企業7名、公的研究機関1名、大学2名、その他所属1名の合計11名(想定定員)でした。当日の進行は以下のとおりです。

- 13:00-13:20 ABINIT-MP の整備状況、新機能 【望月】
- 13:20-13:35 ABINIT-MP による相互作用解析の事例 【望月】
- 13:35-13:50 スーパーコンピュータ「Wisteria/BDEC-01」の紹介 【中島先生】
- 13:50-14:00 Wisteria/BDEC-01(Odyssey)システムへの接続
- 14:00-15:00 実習1：相互作用エネルギー解析の事例 【奥脇氏】
- 15:00-15:20 休憩
- 15:20-17:00 実習2：PIEDA を用いた詳細解析の事例、ものづくり系の事例 【奥脇氏】
- 17:00-17:10 ABINIT-MP の今後の研究開発 【望月】

ABINIT-MP の説明では、基本機能と Open シリーズの展開、ならびにスーパーコンピュータでの高パフォーマンスをご紹介し、さらに現在準備中の Ver. 2 Rev. 8 (2022年8月リリース予定)についても触れました。

実習1では、Odyssey の実習用ジョブクラスを用いて実際に例題を投入し、FMO 計算か

ら得られる最も有用な数値指標であるフラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)による対象系の解析を BioStation Viewer による可視化を交えて行いました。休憩後の実習 2 では、IFIE の成分分解である PIEDA による詳細な理解の仕方を解説すると共に、可視化を伴う軌道レベルの相互作用解析もご紹介しました(実際の実行は Aquarius で行う必要あり)。また、生体分子系の解析に加え、シリカのナノ粒子モデルへのエチレンの吸着なども取り上げ、ものづくり系問題への FMO の応用の可能性の一端を視ていただきました。オンラインでの実施でしたので、オンサイトよりも少しペースを控えての進行となりましたが、大きなトラブルもなく終わることができました。

終了後のアンケートは概ね好評で、説明や実習が「分かりやすい」の項目で 60-80% の評価を頂戴しましたので、ABINIT-MP による FMO 計算の概要をご理解いただけたようです。また、実習の内容・事例を増やして欲しいとのご意見もいただきましたので、次の機会には午前からの開始とするなど、より充実したセミナーとなるように検討したいと思います。



図1 オンラインでのハンズオンセミナーの様子(画像キャプチャ)

#### 【ABINIT-MP の参考アドレス】

[http://www.cenav.org/abinit-mp-open\\_ver-1-rev-22/](http://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-1-rev-22/)

[http://www.cenav.org/abinit-mp-open\\_ver-2-rev-4/](http://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-2-rev-4/)