

仕様書

I 一般仕様

1. 件 名 SALMON 基底状態計算の GPGPU 高速化作業

2. 目 的

国立研究開発法人科学技術振興機構の委託事業である戦略的創造研究推進事業 Q-LEAP の一環として、国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（以下、「QST」という。）が使用する SALMON コードの GPGPU 部分を高速化し、効率的利用のための高度化を行う。SALMON は QST が開発している光・電子相互作用の第一原理計算を行うプログラムパッケージである。大規模計算を効率的に実施するため、SALMON の基礎的機能に関連するサブルーチンには OpenACC Fortran を用いた GPGPU による演算加速機能が実装されている。このうち実時間計算部分は GPGPU 機能の最適化が行われているが、基底状態計算部分は最適化がなされていないため、CPU と比較して低速になっている。本件では、この部分を高速化する GPGPU 実装を行い、並列化効率の計測を行うことを目的とする。

3. 納 期 令和 8 年 2 月 27 日

4. 納入場所

京都府木津川市梅美台 8-1-7

QST 関西光量子科学研究所 研究棟 2 階 B201

5. 業務内容（詳細は II 技術仕様による。）

(1) 基底状態計算部分の GPGPU 実装。

(2) 基底状態計算部分の GPGPU 並列化効率測定。

6. 必要な能力・資格 OpenACC を用いた GPGPU による Fortran コード高速化の経験。

7. 提出図書 下記の書類を提出すること。

(1) II 章 2 項で述べる並列化効率測定で用いた入出力ファイルと作業報告書、実装したプログラムのソースコード一式を電子媒体に記録した形式で納品する。

8. 検査条件

I 章 5 項及び II 章に示す作業完了後、I 章 7 項に定める提出図書の納入をもって検査合格とする。

9. 契約不適合責任

契約不適合責任については、契約条項のとおりとする。

10. 支給品及び貸与品 特になし

11. 作業環境

本作業にあたり発注者は、受注者に対し、GPU を搭載した並列計算機を、リモート

ログインにより利用できる環境を提供する。

12. グリーン購入法の推進

- (1) 本契約において、グリーン購入法（国等による環境物品等の調達に関する法律）に適合する環境物品（事務用品、OA機器等）が発生する場合は、これを採用するものとする。
- (2) 本仕様に定める提出図書（納入印刷物）については、グリーン購入法の基本方針に定める「紙類」の基準を満たしたものであること。

13. その他

受注者は、本来業務を実施することにより取得したデータ、技術情報、成果その他全ての資料及び情報を、発表もしくは公開することはできない。ただし、あらかじめ書面により QST の承認を受けた場合はこの限りではない。

II. 技術仕様

1. 基底状態計算部分の GPGPU 実装

- (1) SALMON コードパッケージの基底状態計算部分について、OpenACC による高速化実装を行う。特に、k 点、軌道、空間の分割による MPI 並列を用いた場合の OpenACC 化を実施する。
- (2) 行列演算では cuBLAS を用いた実装を検討し、性能向上に寄与する場合は実装を行う。
- (3) コンパイル手順は SALMON マニュアルにおける「--arch=nvhpc-openacc」、コンパイラは NVIDIA HPC SDK ver 23.11 以降とする。また、OpenACC のデータ管理は unified memory 機能を用いる。
- (4) 動作確認に使用する入力ファイルは、同パッケージの testsuites における 101_C2H2_gs および 111_bulk_Si_gs_dp とする。動作確認では同梱の verification が正常終了することを確認する。
- (5) 101_C2H2_gs で使用する実配列波動関数用ルーチンと、111_bulk_Si_gs_dp で使用する複素配列波動関数用ルーチンそれぞれについて最適化を行う。

2. 基底状態計算部分の GPGPU 並列化効率測定

- (1) 複数の GPU を用いた MPI 並列計算で、基底状態計算の並列化効率の測定を行う。CPU のみを使用した場合との並列化効率の比較を行う。
- (2) 並列化効率の測定対象とする入力ファイルは、101_C2H2_gs および 111_bulk_Si_gs_dp をもとにパラメータを大規模化したものを基準とする。詳細は作業打ち合わせ時に協議の上決定する。

(要求者)

部課 (室) 名 : 量子応用光学研究部 超高速電子ダイナミクス研究プロジェクト

氏 名 : 山田 俊介

コンピュータプログラム作成等業務特約条項

(目的物)

第1条 この契約の目的物は、次の各号の一又は二以上の組み合わせに該当するコンピュータプログラムの著作物（データ、データベース、マニュアル及びドキュメンテーションを含む。以下同じ。）及び当該コンピュータプログラムによる計算結果であって、仕様書に定める範囲のものとする。

- 一 コンピュータプログラム（コンピュータプログラムの設計を含む。）著作物
- 二 甲が提供するコンピュータプログラムの著作物により得られた計算結果
- 三 乙が所有するコンピュータプログラムの著作物及びこれにより得られた計算結果

(権利の帰属等)

第2条 この契約により作成された目的物（第1条各号に掲げるものをいう。以下同じ。）に係る著作権その他この目的物の使用、収益及び処分（複製、翻訳、翻案、変更、譲渡・貸与及び二次的著作物の利用を含む。）に関する一切の権利は甲に帰属するものとする。ただし、本契約遂行のために使用するプログラム等のうち、本契約締結以前から、乙が所有するものについては、その著作権は乙に帰属するものとする。

2 乙は、この契約により作成された目的物について、甲又は甲の指定する者に対して著作者人格権を行使しないものとする。

(氏名の表示の制限)

第3条 乙は、第1条に規定する著作物に著作者氏名を表示しないものとする。

(第三者の権利の保護)

第4条 乙は、この業務の実施に関し第三者（著作者を含む。）の著作権その他の権利を侵害することのないよう必要な措置を自らの責任において講じなければならない。

(技術情報)

第5条 甲が、この業務の実施に関し、乙の保有する技術情報を知る必要が生じた場合には、乙は、この契約の業務に必要な範囲内において当該技術情報を甲に無償で提供しなければならない。

2 甲は、乙からの書面による事前の同意を得た場合を除き、前項により知り得た技術情報を第三者に提供しないものとする。

(プログラム開発に必要な技術情報)

第6条 甲は、仕様書に定めるところにより、乙がこの業務の実施に必要な計算コードその他必要な技術情報を乙に使用させることがある。

(公表)

第7条 乙は、目的物を甲に引き渡す前に、これを第三者に公表してはならない。

2 乙は、この契約により得られた成果について発表し、若しくは公開し、又は第三者に提供しようとするとき、及びこの業務の実施によって知り得た技術情報を第三者に開示しようとするときは、あらかじめ書面による甲の承認を得なければならない。

以上