

仕 様 書

1 件 名 令和 8 年度数値海洋モデル Kinaco の GPU 計算機対応支援業務

2 業務契約期間 契約締結日～令和 9 年 2 月 2 6 日

3 業務実施場所 請負者において行うものとする。

4 目 的

国立研究開発法人国立環境研究所（以下「NIES」という。）では、日本学術振興会 科学研究費助成事業（科研費）学術変革領域 (A)「マルチスケールモデリングによる陸域－沿岸域－外洋域間の淡水・物質輸送過程の解明」研究課題において、粒子追跡手法を統合した非静力学海洋モデルを用い、陸域から外洋域までを包括する日本沿岸の統合シミュレーションシステムの開発を進めている。

近年の科学高性能計算環境では GPU を中心とするアクセラレータ利用が標準化され、今後の数値モデル開発では GPU 計算環境に対応したコード基盤を整備することが必須となりつつある。既存の数値モデル資産を維持しつつ GPU 環境へ段階的に対応させることは、研究継続性、結果再現性、保守性及び将来の計算性能向上の観点から重要である。

本業務は、NIES が開発する数値海洋モデル Kinaco（以下「本数値モデル」という。）に GPU 計算環境への対応を付加することにより、今後の科学高性能計算環境においても高い実効計算性能を発揮し得るコード基盤を整備し、上記科研費課題並びに今後 NIES が実施する沿岸海洋環境研究に活用可能な数値海洋モデリング研究基盤を構築・補強することを目的とする。

5 業 務 内 容

請負者は、本業務の遂行に当たり、NIES 担当者と十分な打合せを行い、以下の業務を実施することとする。

(1) 現行コード構成の把握と GPU 対応方針の策定

請負者は、NIES が提供する本数値モデルの最新コードリポジトリを確認し、Fortran90 言語で記述された、粒子追跡モジュールおよび多重格子ソルバーに関する現行設計を把握した上で、必要な GPU 向け実装に関する作業方針を作成すること。

主たる作業対象ファイルは、粒子モジュール本体を格納する `particles.F90`（約 10,000 行）および多重格子ソルバーモジュールを格納する `solver3d.F90`（約 5,400 行）と `solver_util.F90`（約 3,500 行）とする。ただし、粒子追跡のオフライン実行を制御する `offline.F90` 及びこれらが参照する `geometry.F90`、`domain.F90`、`velocity.F90`、`scratch.F90`、`io.F90` の一部、実行環境定義およびコンパイル・ビルドに用いる `Makefile` や `configure.sh` およびそれらの関連ファイルについても、業務遂行上必要とされる場合は内容を確認するものとする。

作業方針の策定に当たっては、以下の事項を尊重すること。

- 既存のファイル・モジュール構成を維持すること。作業対象を別プログラム又は独立コードとして再実装しないこと。
- 既存のアルゴリズムレベルの設計を変更せず、OpenACC 指示文、データ配置および型指定、GPU 向け補助実装、ライブラリ呼び出し等を追加することで GPU 対応を行う方針とすること。
- GPU 向け実装及び OpenACC の有効化は、ビルド時オプション等により選択可能とし、既存の CPU 向け実装を損なわないようにすること。
- 既存のプログラムコードの本業務の作業対象ではない部分との統合可能性を損なわないこと。
- 既存の CPU 向け計算アルゴリズムを変更しないこと。既存コードへの OpenACC 指示文挿入のみによる GPU 対応が困難である部分、又は著しい性能劣化が想定される部分が存在する場合には、NIES 担当者と協議して対応するものとし、請負者の独自判断でプログラム構成を改変しないこと。
- 初期化及び入出力を除き CPU-GPU 間のデータ転送を多用しない設計とすること。

- CPU 向けに既に実装されている MPI 並列実行を踏襲し、GPU 上での MPI 並列実行に対応すること。
- particles.F90 内で prefix sum 及び radix sort に相当する処理については、GPU 専用ライブラリ又は GPU 向け実装への置換方針を明示すること。

なお、多重格子線形ソルバーモジュール (solver3d.F90, solver_util.F90) については、本業務には実装は含まれないので、実装作業を伴わず現行コードから把握できる範囲で GPU 対応方針の策定・提案を行うものとする。

請負者が本数値モデルの過去のバージョンについて知見又は経験を有している場合においても、特に以下の点に留意すること。

- 過去バージョンでサブルーチン内のワーク領域として多用されていた自動割り付け配列は廃止され、scratch モジュールによるワーク配列メモリの一括管理が導入されている。
- 過去バージョンでタイムステップ毎に実施されていた粒子の二重バッファによる全粒子データ配列の gather-swap は実施頻度の指定が可能となり、一部の格子単位での粒子アクセスには間接参照を用いる設計に変更されている。
- 粒子の動的生成・消滅のためのメモリ領域確保は prefix sum を用いた実装となり、OpenMP スレッド並列において過去バージョンに存在した ATOMIC 命令は排除されている。

(2) 粒子モジュールへの GPU 対応実装の追加

請負者は、NIES 担当者が承認した作業方針に基づき、本数値モデルのオフライン粒子移流拡散実行の主要パスへ OpenACC 指示文及び必要な補助コードを追加すること。必要に応じて CUDA 等の GPU 向け指示文又は補助実装を追加し、基礎的な演算ルーチンを GPU 向けライブラリ呼び出しに置換することができる。実装に当たっては、以下を満たすこと。

- ターゲットハードウェアは NVIDIA 社 H200 とするが、可能な限り特定 GPU 世代に依存しない設計・実装とすること。
- 利用コンパイラ処理系は特別な理由が無い限り NVIDIA HPC SDK の受注時点で利用可能な最新の安定板とすること。
- 上記コンパイル向けのオプション等は sys/Sysdep.nvhpc ファイルに定義されている。請負者の作業環境において改変・調整が必要な場合は、既存コードに実装済みのアーキテクチャ可搬性を損なわない形で作業環境に対応するものとする。
- 別途 NIES 担当者が指定するオフライン粒子追跡実験設定（以下「テスト設定」という）を動作確認及び性能測定に用いること。実験の規模は請負者が得られる作業環境を踏まえて、NIES 担当者と協議の上で、業務開始後速やかに定めるものとする。
- 初期化・終端処理及びファイル入出力を除き、通信を含むオフライン実行における主要計算を GPU 上で実施するため、データ配置、データ移動及び GPU メモリ常駐方針を明示すること。特に、GPU 実行中に継続して使用される主要データ配列及び作業配列が GPU メモリ上に確保・常駐され、タイムステップ毎に CPU-GPU 間の転送が発生しない設計とすること。計算実行中における主要データの GPU 側確保又は常駐が困難な場合は、理由を明示すること。
- MPI 通信においては、GPU-aware MPI を用いて GPU メモリ上の送受信バッファを直接 MPI 通信に使用することを前提とすること。請負者が用いる作業環境において当該機能を利用できない場合は、その制約、代替した確認方法、及び H200 環境で想定される実装上の留意点を明示すること。
- 粒子モジュール (particle.F90) 内で独自実装されている prefix sum 及び radix sort 手続きは、必要に応じて既存アルゴリズム構成を維持したまま GPU 専用ライブラリ又は GPU 向け実装へ置換すること。
- NIES 担当者が指定するテスト設定実験について、初期化及び入出力当を除く主要な計算を GPU 上で実施すること。CPU-GPU 間のデータ転送が避けられない場合は、その発生箇所および頻度を把握し、全体性能への影響評価を行うこと。
- 既存コードにおいて、OpenACC ディレクティブ挿入だけでは著しい性能劣化が想定される部分が存在する場合には、CPP プリプロセッサ分岐等により、CPU 向けコードを損なわない形態で当該部分を置き換える GPU 向けコードを追加してよい。ただし、CPU 向けコードとの結果整合性及び保守性を確保すること。
- 新たにファイルを追加する場合は、追加の必要性、ファイルの役割、既存コードとの関係を事前に NIES 担当者と協議し、承認を得た上で行うこと。
- 請負者は、NIES 担当者が別途提供する本数値モデルの試験用 GPU 移植コード等（以下試験用コード）を参考にし、試験用コードを本業務に取り込む場合には、本業務での作業実施分との区分を明確にし、試験用コード実装それ自体を本業務成果物

として扱ってはならない。

(3) 実行テスト及び性能測定

請負者は、実装後、NIES 担当者が指定するオフライン粒子追跡シミュレーションのテストケースにより実行テスト及び性能測定を行うこと。少なくとも、以下を確認すること。

- NIES 担当者指定のオフライン粒子移流拡散実験が GPU 上で実行可能であること。
- 粒子の動的生成・消滅、MPI 転送を含むオフライン移流拡散計算における計算結果の CPU 実行結果との整合性があること。
- 主要な粒子移流拡散カーネル、通信処理、粒子データメモリ再配置処理の実行時間の測定。

性能測定では、本数値モデルに組み込まれた簡易性能測定機能の出力に加え、NVIDIA HPC SDK に付属する NVIDIA Nsight Systems 及び必要に応じて NVIDIA Nsight Compute 等のプロファイラを用いて GPU 上での実行時間を測定し、各処理単位での CPU 実行との速度比較、GPU 上で律速となる処理、データの CPU-GPU 間転送の量・頻度とそのコスト、OpenACC 化後も残る性能ボトルネック、及び今後の性能向上に向けた施策を整理すること。

性能測定に用いた GPU、CPU、コンパイラ、CUDA Toolkit、OpenACC 処理系、MPI ライブラリ等の環境を明記すること。前項(2)で指定されたターゲットハードウェア環境以外で測定した場合は、指定ハード環境との差異及び測定結果の解釈上の制約を報告書に記載すること。

請負者が実施したものと同等の性能測定を NIES 担当者が再現するために十分な情報及び実行スクリプト等を提供すること。

(4) 報告及び打合せ

請負者は、業務内容(1)、(2)及び(3)の各段階が完了した時点で NIES 担当者に状況を報告し、必要に応じて進捗確認及び方針策定のための協議を行うこと。また、業務遂行期間中に既存仕様との不整合又は性能上の重大な問題が発生した場合、その他必要と認められる場合には、速やかに NIES 担当者へ報告し、対応方針について協議すること。協議時には、NIES 担当者の求めに応じて、作業途中のプログラムコードファイル等を NIES 担当者と共有すること。なお作業コードの共有には特別の理由が無い限り NIES 担当者が提供する git リポジトリを用いることとする。

また、(3)の終了段階において、請負者が性能測定に用いたのと同様構成のオフライン実験を NIES 担当者が追試可能とするものとし、それに必要な作業対象プログラムコード、実行設定ファイル、実行スクリプト、性能測定結果表示スクリプト、およびその他必要とされるプログラム一式を NIES 担当者に提供すること。

6 業務実施体制及び資格

本業務の請負者は、次に掲げるすべての要件を満たす者でなければならない。

- (1) NVIDIA 製 GPU 環境における、OpenACC および CUDA Fortran による数値流体および粒子追跡計算についての実務経験を有すること。
- (2) 本数値モデルまたは同等規模以上の数値海洋モデルまたはそれに相当するプログラムのコード実装・最適化に関する実務経験を有すること。

請負者は、本業務履行可能な体制を整えること。作業実施に当たり、発注者は前項(2)で指定されたターゲットハードウェア環境を請負者に提供する責任を負わないものとする。当該ハードウェアでの作業環境が得られない場合は、請負者において可能な限り当該ハードウェアと互換性のある環境を用いること。また、作業環境のスペック詳細を NIES 担当者と共有すること。業務遂行に際し、指定ターゲットハードウェアでのテスト実行が必須と認められる場合においては、請負者が提供するテスト実行環境を NIES 担当者がターゲットハードウェア上で代行実行する可能性がある。

7 成果物の提出

請負者は、業務契約期間終了時までに以下の成果物を NIES 担当者へ提出するものとする。

- (1) 業務結果報告書 2 部
- (2) 本業務において開発したプログラムのソースコード等 一式
(ビルド用設定ファイル、およびテスト実験の再現に必要な各種構成ファイルを含む。発注者の指定する Git repository へのコミットによる提出とする。)
- (3) 分析結果データ集 一式

(tar または zip アーカイブされた電子データを、メール添付または指定するオンラインデータ共有サービスにて提出するものとする)

報告書の仕様は、契約締結時における国等による環境物品等の調達に関する法律（平成 12 年法律第 100 号）第 6 条第 1 項の規定に基づき定められた環境物品等の調達の推進に関する基本方針（以下「基本方針」という。）の「印刷」の判断の基準を満たすこと。

ただし、当該「判断の基準」を満たすことが困難な場合には、NIES 担当者の了解を得た場合に限り、代替品による納品を認める。

なお、印刷物にリサイクル適性を表示する必要がある場合は、以下の表示例を参考に、裏表紙等に表示すること。

リサイクル適性の表示：印刷用の紙にリサイクルできます
この印刷物は、グリーン購入法に基づく基本方針における「印刷」に係る判断の基準にしたがい、印刷用の紙へのリサイクルに適した材料〔A ランク〕のみを用いて作製しています。

なお、リサイクル適性が上記と異なる場合は NIES 担当者と協議の上、基本方針（<https://www.env.go.jp/policy/hozen/green/g-law/index.html>）を参考に適切な表示を行うこと。

9 著作権等の扱い

- (1) 請負者は、本業務の目的として作成される成果物に関し著作権法第 27 条及び第 28 条を含む著作権の全てを NIES に譲渡するものとし、当該対価は本契約金額に含むものとする。
- (2) 請負者は、成果物に関する著作者人格権（著作権法第 18 条から第 20 条までに規定された権利をいう。）を行使しないものとする。ただし、NIES が承認した場合は、この限りではない。
- (3) 上記 (1) 及び (2) に関わらず、成果物に請負者が既に著作権を保有しているもの（以下「既存著作物」という。）が組み込まれている場合は、当該既存著作物の著作権についてのみ、請負者に帰属する。提出される成果物に第三者が権利を有する著作物が含まれる場合には、請負者が当該著作物の使用に必要な費用の負担及び使用許諾契約等に係る一切の手続を行うものとする。

10 情報セキュリティの確保

請負者は、国立研究開発法人国立環境研究所情報セキュリティポリシーを遵守し、情報セキュリティを確保するものとする。特に下記の点に留意すること。なお、国立研究開発法人国立環境研究所情報セキュリティポリシーは以下 URL において公開している。

(https://www.nies.go.jp/about/info-security/sec_policy.pdf)

- (1) 請負者は、請負業務の開始時に、請負業務に係る情報セキュリティ対策の遵守方法及び管理体制、事故時における緊急時の連絡体制について、NIES 担当者に書面で提出すること。また、変更があった場合には、速やかに報告すること。
- (2) 請負者は、NIES から提供された情報について目的外の利用を禁止する。
- (3) 請負者は、NIES から要機密情報を提供された場合には、機密保持義務を負うこととし、当該情報の機密性の格付けに応じて適切に取り扱われるための措置を講ずること。
- (4) 請負者は、NIES から提供された要機密情報が業務終了等により不要になった場合には、確実に返却し又は廃棄し、文書にて報告すること。
- (5) 請負者は、国立研究開発法人国立環境研究所情報セキュリティポリシーの履行が不十分と見なされるとき又は請負者において請負業務に係る情報セキュリティ事故が発生したときは、必要に応じて NIES の行う情報セキュリティ監査を受け入れること。また、速やかに是正処置を実施すること。
- (6) 業務に用いる電算機（パソコン等）は、使用者の履歴が残るものを用いてこれを保存するとともに、施錠等の適切な盗難防止の措置を講ずること。また、不正プログラム対策ソフトが導入されており、利用ソフトウェアやその脆弱性等、適切に管理された電算機を利用すること。
- (7) 再委託することとなる場合は、事前の承諾を得て再委託先にも以上と同様の制限を課して契約すること。

11 検 査

本業務終了後、10 日以内に NIES 担当者立会いによる本仕様書に基づく検査を実施し、合格しなければならない。

12 協 議 事 項

本業務に関し疑義等を生じたときは、速やかに NIES 担当者と協議の上、その指示に従うものとする。

13 そ の 他

(1) 業務遂行における遵守事項

(ア) 請負者は、本業務の遂行において、既存の実装例、性能試験用コード、外部ライブラリ利用例等を参考にしていよい。ただし、参考実装等のソースコードをそのまま取り込まないこと。また、参考実装による独自データ構造等を既存コードの代替として用いないこと。その他、BSD 3 条項ライセンスの下でのオープンソースソフトウェア公開を妨げるおそれのあるコードが混入しないよう努めるものとする。

(イ) 請負者は、本業務において、効率化や品質向上のために商用生成 AI サービス（以下「生成 AI サービス」という）を利用してよい。ただし、利用にあたっては以下の条件をすべて遵守しなければならない。

- ① NIES から提供された本数値モデルソースコードやその他関連情報を生成 AI サービスに入力する場合、入力データがサービス提供事業者のモデル等の学習に利用されない設定・契約形態を使用すること。
- ② 本業務に係る生成 AI サービスのプロンプト履歴等は業務終了後すみやかに破棄し、他の目的に転用しないこと。
- ③ 本業務の成果物の一部を生成 AI サービスを利用して作成・修正した場合は、業務結果報告書等において、以下の情報を明記すること。
 - ・ 利用した生成 AI サービス名・モデル名およびサービスの契約形態・プラン（モデル学習に利用されない契約であること）。
 - ・ 対象となるソースコードの範囲（モジュール・関数名等）と、生成 AI サービスによって改善・改良された具体的内容。

(2) 請負者は、本業務実施に係る活動において、国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律（グリーン購入法）を推進するよう努めるとともに、物品の納入等に際しては、基本方針で定められた自動車を利用するよう努めるものとする。