

仕 様 書

1. 件名

量子計算ソリューションによるマテリアルデータ科学基盤開発推進用ワークステーション

2. 研究の概要

国立研究開発法人産業技術総合研究所 マテリアル DX 研究センター（以下「産総研」という）では、「量子計算ソリューションによるビジネスエコシステム構築の戦略的取組」（研究計画期間：令和 9 年度まで）の研究を行っている。本研究は、量子コンピュータを活用した材料設計プラットフォームの開発を目指し、その基盤となる古典計算機によるマテリアルズ・インフォマティクス手法の開発および解析を行うものである。

3. 装置の概要

本装置は、古典機械学習により有機分子材料の構造的特徴量を抽出し、それに基づく物理化学的性質の予測モデルの構築および材料設計に向けた最適化計算等に使用するワークステーションである。Python コード等による機械学習ライブラリを用いたデータ解析や、大規模ニューラルネットワークモデルの構築に対応可能な加速演算性能を備えるとともに、量子化学計算の実行に十分な演算性能も保有する。

4. 装置の基本構成

- 量子計算ソリューションによるマテリアルデータ科学基盤開発推進用ワークステーション

5. 基本構成別仕様

5.1 CPU

- AMD EPYC9274F（クロック周波数 4.05 GHz/24 コア）相当またはそれ以上の CPU が 1 基以上搭載されていること。
- CPU 冷却は調達請求者によるメンテナンスが不要な水冷式であり、それらの冷却に必要な装置は全てケース内に収められていること。
- 動作音は高負荷時 50 dB 以下であること。
- ISO11201:2010/ISO7779:2010 に基づくテスト方式にて性能試験が行われている製品であること。

5.2 GPU

- NVIDIA・RTX PRO6000 Max-Q Workstation Edition（CUDA Core 24064/GDDR7 96GB/TDP300W）相当またはそれ以上の性能を有する製品が 2 基以上搭載されていること。

5.3 マザーボード

- 2 ポート以上の 10 Gigabit Ethernet 対応ポートが実装されていること。

5.4 メモリ

- ・DDR5-4800 規格以上の ECC 付きメモリを 8 枚以上搭載し、計 512 GB 以上のメモリを有すること。
- ・メモリ基板は 1 枚あたり 64 GB 以上とし、メモリスロットは 8 DIMM スロット以上を備えること。

5.5 ストレージ

- ・2 TB 以上の NVMe M.2 SSD ドライブが 1 基以上搭載されていること。
- ・3.5 inch サイズのストレージが 4 台以上搭載可能であり、それら全てがホットスワップベイに対応していること。

5.6 ケース

- ・ケースはタワー及びラックマウント設置が可能な設計をされたものであること。
- ・サイズはタワー設置時に高さ 490mm、幅 300 mm、奥行き 650 mm 以内に収まること。
- ・タワー設置時には専用キャスターが取り付けられること。

5.7 電源

- ・2000 W (100 V 1200 W/200 V 2000 W) 以上の電源ユニットが 2 台以上搭載されていること。

5.8 付属品

- ・ラックマウント用レールおよびタワー設置用キャスターが 1 セットずつ付属すること。
- ・100V 電源用ケーブルが 2 セット付属すること。

5.9 ソフトウェア・設定

- ・Ubuntu 24.04 LTS 相当をインストールした状態で納入すること。
- ・搭載されている GPU に対応した CUDA をインストールすること。
- ・AOCC 及び NVIDIA HPC SDK をインストールすること。
- ・上記以外の基本的なシステム設定を行い、利用可能な状態で納入すること。
- ・詳細については調達請求者と別途協議の上、設定等を受注者側で実施すること。

5.10 付帯事項

- ・ワークステーションを構成する主要な機器は 1 年間以上保証のある信頼性が高いものであり、正規流通製品、部品で構成し、正常動作する組み合わせであること。
- ・標準保証として、調達機器に関して技術サポートを受けられること。
 - ①納入後 3 年間は、通常の使用において不具合が発生した場合は、無償修理に応じること。
 - ②障害時において復旧のため、通報を受けてから 1 営業日以内に対策を回答する体制を有すること（但し、土曜・日曜・国民の祝日に関する法律第 3 条に規定する休日及び年末年始（12/29～1/3）を除く）。
 - ③電話による迅速なサポートがあること。特に、ハードウェア障害発生に対しては受付着

呼が確実で、顧客名、S/N等、必要最小限のやりとりにて障害内容相談に入れるサポートシステムであること。

- ・機器マニュアルについて、受注者が管理する Web サイトより常時最新版がインストール可能な環境であること。また、使用・設定方法等について相談・サポート窓口が常時用意されていること。

6. 納入物品

- ・量子計算ソリューションによるマテリアルデータ科学基盤開発推進用ワークステーション
1台
- ・製品保証書 1部（紙媒体）

7. 納入の完了

本装置は、「6. 納入物品」に記載された納入物品が過不足なく納入され、仕様書を満たしていることを確認して、納入の完了とする。

8. 納入期限及び納入場所

納入期限：2026年1月30日

納入場所：茨城県つくば市梅園 1-1-1

国立研究開発法人産業技術総合研究所 つくばセンター中央事業所 2群
2-1D棟 711室 マテリアル DX 研究センター

9. 特記事項

- (1)本仕様書の技術的内容および知り得た情報に関しては、守秘義務を負うものとする。
- (2)本仕様書の技術的内容に関する質問等については、調達請求者と協議すること。また、本仕様書に定めのない事項および疑義が生じた場合は、調達担当者と協議のうえ決定する。
- (3)サプライチェーン・リスクに対応するため、別紙に記載する事項に従って契約を履行しなければならない。

10. セキュリティ要件

- ・情報セキュリティポリシーに関する要件

- (1)本業務の遂行に当たっては、産総研の情報セキュリティポリシーを遵守するとともに、情報セキュリティポリシーにおいて産総研に求められる水準の情報セキュリティ対策を講じること。産総研の情報セキュリティ規程については、下記 URL を参照のこと。その他の情報セキュリティポリシーの詳細については受注者決定後に提示する。

【国立研究開発法人産業技術総合研究所情報セキュリティ規程】

https://www.aist.go.jp/Portals/0/resource_images/aist_j/outline/comp-legal/pdf/securitykitei.pdf

- (2)産総研の情報セキュリティポリシーの見直しが行われた場合は、見直しの内容に応じた情報セキュリティ対策を講じること。なお、対応内容については産総研担当者に事前に報告し承認を得ること。

サプライチェーン・リスク対応に係る特記事項

1. サプライチェーン・リスクへの対応

受注者は、機器等の意図的な不正改造及び情報システム又はソフトウェアに不正なプログラムを埋め込むなど、国立研究開発法人産業技術総合研究所（以下、「産総研」という。）の意図しない変更が加えられたときに生じ得る情報の漏えい若しくは破壊又は機能の不正な停止、暴走その他の障害等の情報セキュリティ上のリスク（以下「サプライチェーン・リスク」という。）に対応するため、受注者は「IT 調達に係る国の物品等又は役務の調達方針及び調達手続に関する申合せ」（平成 30 年 12 月 10 日関係省庁申合せ）に基づく対応を図らねばならない。

2. 意図しない変更に対する対策

- ①受注者は、本業務の履行に際して、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得るべきソースコード、プログラム等（以下「ソースコード等」という。）の埋込み又は組込みその他産総研担当者の意図しない変更を行ってはならない。
- ②受注者は、本業務の履行に際して、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得るべきソースコード等の埋込み又は組込みその他産総研担当者の意図しない変更が行われないように相応の注意をもって管理しなければならない。
- ③受注者は、本業務の履行に際して、情報の窃取等により研究所の業務を妨害しようとする第三者から不当な影響を受けるおそれのある者が開発、設計又は製作したソースコード等（受注者がその存在を認知し、かつ、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得るべきものに限り、主要国において広く普遍的に受け入れられているものを除く。）を直接又は間接に導入し、又は組み込む場合には、これによってサプライチェーン・リスクを有意に増大しないことを調査、試験その他の任意の方法により確認又は判定するものとする。

3. サプライチェーン・リスクにかかる調査の受入れ体制

- ①受注者は、本業務に産総研担当者の意図しない変更が行われるなど不正が見つかったときは、追跡調査や立入検査等、産総研と連携して原因を調査し、サプライチェーン・リスクを排除するための手順及び体制を整備し、当該手順及び体制を示した書面を産総研担当者に提出しなければならない。

4. サプライチェーン・リスクを低減するための対策

- ①受注者は、サプライチェーン・リスクを低減する対策として、本業務の設計、構築、運用・保守の各工程における不正行為の有無について定期的または必要に応じて監査を行う体制を整備するとともに、本業務により産総研に納入する納入物品に対して意図しない変更が行われるリスクを回避するための試験を行わなければならない。当該試験の項目は、情報セキュリティ技術の趨勢、対象の情報システムの特性等を踏まえ、受注者において適切に設定するものとする。
- ②機器の納入であり、かつ、設計、構築、運用・保守の各工程が存在しない場合は、4. ①の対応は不要。

5. 受注者の業務責任者

- ①受注者は、本業務の履行に従事する業務責任者及び業務従事者(契約社員、派遣社員等の雇用形態を問わず、本業務の履行に従事する全ての従業員をいう。以下同じ。)を必要最低限の範囲に限るものとする。
- ②機器納入であり、かつ、設計、構築、運用・保守の各工程が存在しない場合は、5. ①の対応は不要。

6. 再委託

6.1 本業務の第三者への委託の制限

受注者は、産総研の許可なく、本業務の一部又は全部を第三者(再委託先)に請け負わせてはならない。ただし、6.2 に定める事項を遵守する場合はこの限りではない。

6.2 第三者への委託に係る要件

- ①受注者は、本業務の一部又は全部を第三者に再委託するときは、再委託先の事業者名、住所、再委託対象とする業務の範囲、再委託する必要性について記載した承認申請書を、委託元である産総研に提出し、書面による事前承認を受けなければならない。
- ②受注者は、本業務の一部又は全部を第三者に再委託するときは、再委託した業務に伴う再委託者の行為について、全ての責任を負わなければならない。
- ③受注者は、知的財産権、情報セキュリティ(機密保持を含む。)及びガバナンス等に関して、本仕様書が定める受注者の責務を再委託先も負うよう、必要な処置を実施し、その内容について委託元である産総研の承認を得なければならない。
- ④受注者は、受注者がこの仕様書の定めを遵守するために必要な事項について本仕様書を準用して、再委託者と約定しなければならない。
- ⑤受注者は、前号に掲げる情報の提供に加えて、再委託先において本委託事業に関わる要員の所属、専門性(情報セキュリティに係る資格・研修実績等)、実績及び国籍についての情報を委託元である産総研へ提出すること。
- ⑥受注者は、再委託先において、産総研の意図しない変更が加えられないための管理体制について委託元である産総研に報告し、許可又は確認(立入調査)を得ること。

7. その他

- ①提出された資料等により産総研担当者に報告された内容について、サプライチェーン・リスクが懸念され、これを低減するための措置を講じる必要があると認められる場合に、調達担当者は受注者に是正を求めることがあり、受注者は相当の理由があると認められるときを除きこれに応じなければならない。
- ②産総研は、受注者の責めに帰すべき事由により、本情報システムに産総研担当者の意図しない変更が行われるなど不正が見つかった場合は、契約条項に定める契約の解除及び違約金の規定を適用し、本業務契約の全部又は一部を解除することができる。