

仕 様 書

1. 件名

量子・AI ハイブリッド技術による次世代 RNA アプタマー創薬のブラックボックス最適化手法開発に向けた調査およびプログラム開発

2. 研究の目的

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。）生体システムビッグデータ解析オープンイノベーションラボラトリー（以下、「CBBDOIL」という。）では、国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 委託事業「量子・AI ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業」の研究開発項目①「量子・AI アプリケーション開発・実証」において、「量子・AI 次世代創薬」に係る研究開発をしている。

本事業では、AI と量子計算を融合した新技術を活用して、新しい創薬分子やターゲット分子を創出する技術基盤を確立することを目指し、特に「RNA アプタマー創薬」に焦点を当てて量子・AI ハイブリッド技術を活用した新たなアプタマー候補の生成に向けた開発および実証を進めている。

本業務は、これまで産総研が開発を行ってきた量子コンピュータを用いたアプタマー配列最適化関数をさらに発展させるための技術調査、プログラム開発および試計算を行うものである。

3. 作業の概要

本業務は、RNA アプタマーの最適化において、Variational Autoencoder (VAE) の離散的潜在表現を活用した新たな最適化手法の開発を目的として実施するものである。本業務では、量子アニーリングなどの組合せ最適化技術との親和性が高い、離散的（バイナリ形式の）潜在表現を有する VAE を活用する新たな最適化手法を開発することを目的とする。

本業務における具体的な作業内容は以下の通りである：

1. バイナリ形式の潜在空間を有する VAE に関する文献調査

バイナリ形式の潜在表現を有する VAE に関する文献調査を行い、入出力

やネットワーク構造について整理する。

2. 過年度に実施した目的関数に関するパラメータスタディ

VAE における RNA 評価関数の設計に向けて、過年度に産総研で開発した二次構造を考慮した目的関数を基に、異なる条件下でのパラメータスタディを実施する。

3. アラインメントプログラムの開発

VAE の特徴量として利用することを目的として、RNA 配列および二次構造情報を統合的に扱うアラインメントプログラムを開発する。

本業務を通じて、離散的潜在表現の活用、RNA 二次構造情報の統合、及び最適化目的関数のパラメータスタディを行うことで、RNA アプタマー設計の効率性と精度を向上させるための技術基盤を構築することを目指す。

4. 作業項目

- (1) バイナリ形式の潜在空間を有する VAE に関する文献調査
- (2) 過年度に実施した目的関数に関するパラメータスタディ
- (3) アラインメントプログラムの開発

5. 作業項目別仕様内容

5-1. バイナリ形式の潜在空間を有する VAE に関する文献調査

本作業では、離散的な（バイナリ形式の）潜在空間を持つ VAE に関する既存研究を調査し、その成果を整理・報告する。具体的には、バイナリ潜在表現を有する VAE のネットワーク構造（エンコーダ・デコーダの設計、損失関数の選定など）に関する文献を調査し、RNA アプタマーの最適化に適用可能な手法を整理する。また、バイナリ潜在空間を使用した VAE の応用事例についても調査し、その成果や課題をまとめる。

5-2. 過年度に実施した目的関数に関するパラメータスタディ

本作業では、過年度に産総研で開発した配列および二次構造を考慮した QUBO 形式の目的関数を基に、異なる条件下でのパラメータスタディ

ィを実施し、VAE の評価関数を設計するための基礎データを収集する。具体的には、目的関数における各パラメータ（例：l-mer の長さなど）の影響を調査し、VAE の評価関数を検討するための基礎データの整備を行う。

5-3. アラインメントプログラムの開発

本作業では、VAE の特徴量として利用することを念頭に、RNA 配列およびその二次構造情報を統合的に扱うアラインメントプログラムを設計・開発する。具体的には、まず、既存の配列-構造アラインメントの文献調査を行い、整数計画問題（バイナリ計画）を用いた定式化について調査結果を取りまとめる。その後、産総研担当者およびプロジェクト関係者と協議の上、アニーリングを用いた場合の目的関数を決定する。次に、RNA 配列と二次構造情報を統合的に扱うアラインメントプログラムの設計を行い、試計算を実施する。試計算に用いるデータは、契約締結後に、産総研担当者から指示する。

6. 特記事項

月に1回程度、オンラインまたは対面で産総研担当者に作業進捗報告を行うこと。

7. 受注者に必要な要件等

本作業を行うには高度なバイオインフォマティクス、RNA アプタマー、量子コンピュータ、実験系に対する知見が求められるため、本開発に従事する事業者は、次の項目について、開発実績や学術論文など公表可能な実績を有していることを証明すること。

1. RNA アプタマーの最適設計のための機械学習手法の開発
2. RNA-seq データを用いた解析
3. 量子コンピュータに係る技術調査
4. 量子コンピュータのアルゴリズム開発
5. 量子コンピュータに係るプログラム開発
6. 分子生物学の研究現場での実験系研究者との共同研究

8. 納入の完了

本作業は、「9. 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。

9. 納入物品

下記、産総研が指示する方法にて電子媒体で納入すること。

※電子媒体の場合、原則としてUSB メモリ等の外部電磁的記録媒体は用いないこと。

- (1) バイナリ形式の潜在空間を有する VAE に関する調査報告書 一式
- (2) 目的関数に関するパラメータスタディ報告書 一式
- (3) アラインメントプログラムソースコード 一式

10. 納入期限及び納入場所

納入期限：2025 年 2 月 26 日

納入場所：東京都新宿区大久保 3-4-1

国立研究開発法人産業技術総合研究所

生体システムビッグデータ解析オープンイノベーションラボ
トリ

早稲田大学 63 号館 520 室

11. 成果の取扱い

- (1) 産総研は、受注者が本作業により得られた技術上の成果のうち産総研が指示するもの（以下「成果」という。）についての利用及び処分に関する権利を専有するものとする。
- (2) 受注者は、成果の著作権（著作権法第 27 条及び第 28 条に規定する権利を含む。）及び意匠登録を受ける権利を産総研に無償で譲渡するものとし、著作者人格権を行使しないものとする。ただし、パッケージ製品に係るものは除く。

- (3) 受注者は、契約条項に定める検査に合格後、直ちに別紙様式による著作権財産権譲渡証書及び著作権人格権不行使証書を提出しなければならない。
- (4) 受注者は、産総研に対し、納品した成果品が第三者の知的財産権を侵害しないことを保証するものとする。なお、納品した成果品について、第三者の権利侵害の問題が生じ、その結果、産総研又は第三者に費用や損害が生じた場合は、受注者は、その責任と負担においてこれを処理するものとする。

12. セキュリティ要件

12.1. 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(別途定める読み替え条項に従うものとする。以下同じ。)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。

12.2. その他セキュリティに関する要件

- ① 受注者は、本業務の履行に際して、秘密である旨を示されて貸与を受けた秘密情報を秘密として適切に保持することとし、第三者に開示又は漏洩してはならない。
- ② 受注者は、本業務の履行によって知った一切の情報を本業務の履行以外の目的に利用してはならない。契約終了後も同様とする。
- ③ 貸与品は産総研担当者の了解なしに所外に持ち出しまたは複製してはならない。
- ④ 産総研の所外へ持ち出しまたは複製した貸与品については一覧表を作成し、産総研担当者に提出すること。なお、契約終了後、速やかに返却又は廃棄し、産総研担当者の確認を得たうえで一覧表からの削除を行うこと。

- ⑤ 受注者は、契約締結後、情報セキュリティ管理体制を記載したドキュメントを産総研担当者に提出すること。
- ⑥ 受注者は、本業務において、受注者の従業員若しくはその他の者によって、意図せざる変更が加えられない管理体制とすること。
- ⑦ 受注者は、産総研の求めに応じて、資本関係、役員等の情報、委託事業の実施場所並びに委託事業従事者の所属、専門性（情報セキュリティに係る資格・研修実績等）、実績及び国籍に関する情報提供を行うこと。
- ⑧ 本業務にかかる情報に関する情報セキュリティインシデントが生じた場合、速やかに報告の上、原因の分析を実施し、産総研担当者と対処内容及び再発防止策を検討すること。当該インシデントへの対処を実施するにあたっては、事前に産総研担当者の確認を得ること。
- ⑨ 情報セキュリティインシデントが生じたことで、受注者の作業環境等の確認が必要となった場合には、産総研の調査に協力を行うこと。
- ⑩ 産総研で情報セキュリティインシデントが発生した場合、速やかに調査及び復旧に協力を行うこと。
- ⑪ 産総研担当者より、情報セキュリティ対策の履行が不十分であると指摘された場合は、速やかに是正処置を講ずること。
- ⑫ 本業務の遂行における情報セキュリティ対策の履行状況を確認するために、産総研が情報セキュリティ監査の実施を必要と判断した場合、受注者は、産総研が定めた実施内容（監査内容、対象範囲、実施者等）に基づく情報セキュリティ監査を受け入れること。
- ⑬ 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、受注者に求めている情報セキュリティ対策を、再委託先が実施することを再委託先に担保させるとともに、再委託先の情報セキュリティ対策の実施状況を確認するために必要な情報を産総研に提供し、承認申請書を提出して、事前に産総研の書面による承認を受けた場合はこの限りではない。
- ⑭ 本業務の履行においては、十分な秘密保持を行うこと。
- ⑮ サプライチェーン・リスクに係る情報セキュリティ上の事象が発生した場合、受注者は原因調査などについて産総研担当者と協議の上、主導的に解決を図ること。
- ⑯ 受注者は、受注先及び再委託先において作成した委託事業に係る成果物（システム構成・設定情報、等を含む。産総研に帰属しない著作物を除く。）の納入の完了後速やかに、当該成果物を産総研担当者の許可を得て、抹消すること。また、受注者は、産総研担当者の指示に従い、当該成果物の抹消の確認を受けること。

13. 付帯事項

- ・ 本仕様書の技術的内容及び知り得た情報に関しては、守秘義務を負うものとする。
- ・ 納入されたプログラム等における発注側の責めによらない納入の完了後 1 年以内の動作不良等不具合については、その補修、調整等責任をもって無償で速やかに行うこと。
- ・ 本仕様書の技術的内容に関する質問等については、産総研担当者と協議すること。
- ・ 本仕様書に定めのない事項及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。
- ・ サプライチェーン・リスクに対応するため、「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）に基づき対応を求めることがあるので応じること。

別紙様式

〇〇〇〇年〇〇月〇〇日

著 作 者 財 産 権 譲 渡 証 書

国立研究開発法人産業技術総合研究所 殿

受 注 者
住 所
会 社 名
代表者氏名

印

ソフトウェア作成受注契約 (〇〇〇〇年〇〇月〇〇日 契約)
件 名

上記契約により作成したソフトウェアの所有権及び著作権（著作権法第 27 条及び第 28 条に規定する権利を含む）は、国立研究開発法人産業技術総合研究所に譲渡したことに相違ありません。ただし、上記契約締結前に自己所有していた権利は除くものとします。

別紙様式

〇〇〇〇年〇〇月〇〇日

著作者人格権不行使証書

国立研究開発法人産業技術総合研究所 殿

受注者
住所
会社名
代表者氏名

印

ソフトウェア作成受注契約 (〇〇〇〇年〇〇月〇〇日 契約)
件名

上記契約により作成したソフトウェアの著作権(著作権法第 27 条及び第 28 条に規定する権利を含む)に係わる著作者人格権を行使しないことを約束します。
なお、著作者人格権を行使しようとする場合は、国立研究開発法人産業技術総合研究所の承認を得るものとします。