

仕様書

1. 件名

汎用原子シミュレータ利用ライセンス

2. 研究の概要

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。）では、産総研が保有する研究データを適切に管理・利活用するための環境整備や高付加価値研究の加速に寄与する環境整備のための「研究 DX の推進」を進めている。本件は、特に材料・化学分野において実験・観測を行う研究活動の DX に資するデジタル技術の活用として、最先端の AI ソフトウェアやシミュレーションソフトウェアの導入を進めるためのものである。

3. ライセンスの概要

本ライセンスは、深層学習技術の一種である GNN で第一原理計算結果を学習させた Neural Network Potential (NNP) を構築し、それに基づいて原子スケールで材料の挙動を再現して大規模な材料探索を行うことのできる原子レベルシミュレータのクラウド環境を利用可能とするものである。深層学習技術を使って原子の挙動を再現するために必要なエネルギーや力を直接学習することで電子状態の計算をし、汎用性を維持したまま計算コストを大幅に削減し、現実に近い複雑な系を大量かつ高速に計算することが可能となる。これにより、機能性化学品の合成反応の遷移状態計算や、さまざまな元素により構成される固体触媒表面の有機化合物との反応における遷移状態計算を高速に実施することができるため、計算化学による機能性化学品の合成経路スクリーニングや、固体触媒設計の迅速に実施することが可能となる。

4. 仕様内容

4.1 ライセンス仕様

ライセンスは以下の仕様を満たすこと。

- (1) Neural Network Potential (NNP)は、第一原理計算結果を教師データとし、量子化

学知見を取り込んだ GNN によって構築された AI モデルであること。

- (2) 産総研の各領域での研究用途を想定し、元素 90 種以上の計算が実施可能であること。
- (3) 結晶・分子などの化合物構造からエネルギー・力を算出し、そこから様々な物性・現象を計算可能であること。各種物性値として、以下のものが算出可能であること。
 - 有機分子の振動解析（振動モード・振動数、IR スペクトル）
 - Nudged elastic band 法による反応経路解析
 - 動力学計算（粘性係数、拡散係数、比熱）
- (4) 有機合成反応や均一系触媒反応、不均一系触媒上の反応経路解析が可能であること。
- (5) 計算可能原子数は 1500 原子以上であること。
- (6) 2025 年 2 月 1 日から 2026 年 1 月 31 日まで利用できること。
- (7) 使用可能ユーザ数は 12 であること。

4.2 ドキュメント仕様

受注者は産総研担当者の求めに応じて、以下のドキュメントを提供すること。

- (1) 初学者向けのサービス利用説明チュートリアル
- (2) 物性・特性算出サンプルプログラム
- (3) 物性計算ライブラリ

4.3 稼働環境

- (1) ブラウザのみで実行できるクラウドサービスであること。
- (2) Python ライブラリ「JupyterLab」上で実行でき、他の Python ライブラリと連携したプログラミングが可能であること。
- (3) 産総研担当者が利用する JupyterLab 環境およびデータ格納ストレージは他のテナントと分離した環境とすること。ただし、推論用計算環境はその限りではない。

- (4) ライセンス利用期間中に稼働環境が技術提案書の記載と異なる構成となった場合、受注者は速やかに産総研担当者に報告すること。

4.4 その他

- (1) 受注者は、契約締結後速やかに導入支援のための打ち合わせを開催し、スムーズな利用開始に向けたサポートを実施すること。
- (2) 受注者は、本ライセンスを利用した計算手法についての問い合わせに（2営業日以内に）回答すること。回答者は、材料開発分野での業務経験を持ち、回答のための十分な経験を有する受注者が望ましい。
- (3) 問い合わせは、メール、専用フォーム等で実施可能であること。

5. 貸与品

なし

6. 納入物品

- ・原子レベルシミュレータ利用ライセンス 2ライセンス
- ・履行開始を証明するもの

(ライセンス証書、受注処理完了通知、ライセンス認証通知等)

7. 納入の完了

「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。なお、納入方法については以下を満たすこと。

- (1) 納入期限までに産総研担当者が指定する方式で提出すること。パスワードなど平文で保存するのが望ましくない情報の納入方法については、別途産総研担当者と協議すること。
- (2) 産総研担当者から納入物品の記載事項や内容の不備に関する指摘があった場合には、速やかに修正し、再提出すること。

8. 納入期限及び納入場所

納入期限：2025 年 1 月 31 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 つくば本部・情報技術共同研究棟
研究戦略企画部 研究 DX 推進室

9. 特記事項

- (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) 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。
- (4) 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。
- (5) 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。
- (6) 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。
- (7) 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。
- (8) 本業務の履行においては、十分な秘密保持を行うこと。
- (9) 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. 付帯事項

- (1) 本クラウドサービスにおける発注者側の責めによらないライセンス期間中の動作不良等不具合については、その補修、調整等責任を持って追加費用の請求なしに行うこと。
- (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。