

# 仕 様 書

## 1. 件名

分子および連続体シミュレーション用計算サーバ一式

## 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。)機能材料コンピュータショナルデザイン研究センターでは、科学技術振興機構(JST)さきがけ「複雑な流動・輸送現象の解明・予測・制御に向けた新しい流体科学」(以下、「さきがけ」という。)受託研究課題として、分子の自己集合過程が連続体スケールの現象に及ぼす影響を研究している。

## 3. 装置の概要

本装置は、さきがけ受託研究課題において主に分子シミュレーションおよび連続体シミュレーションを実施するために使用する。具体的には、様々な材料のために古典分子動力学(MD)シミュレーション、粗視化分子動力学(CGMD)シミュレーション、および連続体シミュレーションを実行する。また、得られた物性データの各種解析計算を行う。MD 計算パッケージ GROMACS、CGMD 計算を含む分子シミュレーションパッケージ LAMMPS、および産総研独自の解析プログラム(C言語、Python、Fortranなどの主要なプログラミング言語で作成されたもの)を稼働させて計算することが可能であり、目的遂行に最適な装置である。

## 4. 装置の基本構成

4-1. 分子および連続体シミュレーション用計算サーバ 1台

- (1) ハードウェア構成
- (2) ソフトウェア構成

## 5. 基本構成別仕様

### 5-1. ハードウェア構成

- ①CPU : AMD EPYC 9684X プロセッサ(ベースクロック 2.55GHz、最大ブーストクロック 3.7GHz、1152MB L3 キャッシュ、96 コア、TDP 400 W)と同等以上の性能を有するプロセッサを2基以上搭載すること。
- ②メモリ : DDR5(4800MHz、ECC Registered 規格)を満たす1枚につき16GB以上のものを24枚以上で構成し、合計384GB以上搭載すること。
- ③OS 領域用ディスク : NVMe U.3 接続可能であって、シーケンシャルリードが6800MB/s以上、合計容量960GB以上のSSDを搭載すること。
- ④データ領域用ディスク : NVMe U.3 接続可能であって、シーケンシャルリードが6800MB/s以上、シーケンシャルライトが5600MB/s以上、合計容量15TB以上のSSDを搭載すること。
- ⑤チップセット : System on Chip であること。
- ⑥ポート類 : Mini-DP および USB3.2(Gen1)ポートをそれぞれ2つ以上搭載すること。

- ⑦ネットワークポート：10 ギガビットの転送を行えるネットワークインターフェースを2ポート以上搭載すること。
- ⑧電源：1600W以上の電源容量を持ち、かつ200V電源で駆動が可能である電源装置を搭載すること。
- ⑨筐体：①～⑧の構成要素が無理なく収容可能な2Uの筐体であること。

## 5-2. ソフトウェア構成

- ①OS：Rocky Linux 9.4.0をインストールすること。
- ②環境構築：LDAPを設定すること。
- ③セキュリティソフト：ClamAVをインストール・設定すること。
- ④ソフトウェア：GCC、GFortran、Gnuplot、Python(Ver.3.7.9)、Matplotlibをインストールすること。
- ⑤インストール作業は、すべて受注者が行うこと。

## 6. 貸与品

特になし

## 7. 情報セキュリティ要件

### 7.1. 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](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。

### 7.2. その他セキュリティに関する事項

- 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し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、産総研担当者に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、産総研が提示するチェックリストの内容に基づき、適宜情報セキュリティ対策の履行状況を報告すること。
- ⑫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。
- ⑬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。
- ⑭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。
- ⑮本業務の履行においては、十分な秘密保持を行うこと。

## 8. 特記事項

- ①無償の標準保証として、以下(a)～(d)の内容以上の保証が付帯されること。
  - (a) 不具合発生時、可及的速やかに設置場所にて部品交換等の障害対応を行うこと。  
不具合連絡受付時間(一例)：月～金曜、10～17時（祝日、12/29-1/3 除く）※  
※一般的な営業日、営業時間の連続した7時間とする。予め調達請求者に通知すること。  
受付日や受付時間が十分でない場合、十分な保証に当たらないものとする。
  - (b) 不具合連絡受付から1営業日以内に対策を回答すること。

(c) 納入時の設置環境下、もしくは納入時と同等の設置環境下において、シミュレーション研究の目的で使用する限り、(a)、(b)に従いハードウェアの不具合対応、納入時導入のソフトウェア、OS、各種ドライバーのアップデートに起因する問題のサポートを行うこと。

(d) 以上(a)～(c)の保証を納入の完了から6年間行うこと。

② 搬入、ラックへの設置を行うこと。そのための運搬費・設置費を含むこと。

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。

## 9. 納入確認試験

- ・ 調達請求者立会いの下、本装置を設置、据え付け、調整の後、調達請求者立会いの下、サーバ内に「5. 基本構成別仕様」を満たすすべてのパーツが格納され、また示すすべてのソフトウェアがインストールされていることを確認すること。確認結果をまとめた納入確認試験成績書を調達請求者に提出し、調達請求者が成績書に不備がないことを確認することで納入確認試験の合格とする。

## 10. 納入物品

- ・ 分子および連続体シミュレーション用計算サーバ 1台
- ・ 納入物品一覧表 1部（紙媒体）
- ・ 取扱説明書 1部（紙媒体、DVD、web 閲覧のいずれか）
- ・ 産総研が「8. 特記事項①」のサービスを受けられることを証明する書類（保証書等）  
押印原本 1部（紙媒体）
- ・ 納入確認試験成績書 1部（紙媒体）

## 11. 納入の完了

本装置は、納入確認試験に合格し、「10. 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調達請求者が確認した場合に、納入の完了とする。

## 12. 納入期限及び納入場所

納入期限：2025年2月14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 つくば本部・情報技術共同研究棟 023010

## 13. 付帯事項

- ・ 納入時には、本装置の安全操作及び一般的な保守について説明を行うこと。
- ・ 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。
- ・ 本仕様書の技術的内容等に関しては、調達請求者の指示に従うこと。本仕様書に定めのない事項及び疑義が生じた場合は、調達担当者との協議のうえ決定する。
- ・ グリーン購入法適用品の場合は、グリーン購入法に定められた判断基準を満たすものを

納入すること。

## 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。